SCHAUM'S ouTlines

全美经典 学习指导系列

# 量子力学

〔美〕 Y. 皮莱格 D. 普尼尼 E. 扎阿鲁尔 著
邢泽仁 宁铂 译

- 获得好成绩的帮手
- 介绍了量子力学课程的所有内容
- 二百多道精解习题
- 掌握量子力学习题解法的工具
- 优秀教材的补充读物

科学出版社

麦格劳-希尔教育出版集团

(O-1568.0101)
责任编辑：鄢德平

SCHAUM'S ouTlines

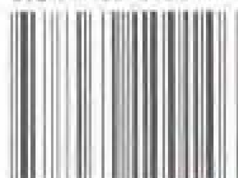
全球销量
超越3000万的
“全美经典学习指导系列”
是您的最佳
学习伴侣！

40年来最畅销的教辅系列
全美著名高校资深教授倾力之作
国内重点高校任课教师全力推荐并担当翻译
省时高效的学习辅导，全面详细的习题解答
迄今为止国内最全面的教辅系列
覆盖大学理工科专业

## 全美经典 学习指导系列

| | | |
|---|---|---|
| 概率和统计 | 2000工程热力学习题精解 | 电气工程基础 |
| 统计学 | 工程力学 | 工程电磁场基础 |
| 离散数学 | 3000物理习题精解 | 数字信号处理 |
| Mathematica使用指南 | 流体动力学 | 数字系统导论 |
| 数理金融引论 | 物理学基础 | 数字原理 |
| 机械振动 | 材料力学 | 电机与机电学 |
| 微分方程 | 2000离散数学习题精解 | 基本电路分析 |
| 统计学原理（上） | 工程热力学 | 信号与系统 |
| 统计学原理（下） | 数值分析 | 微生物学 |
| 微积分 | 量子力学 | 生物化学 |
| 静力学与材料力学 | 有机化学习题精解 | 生物学 |
| 有限元分析 | 3000化学习题精解 | 分子和细胞生物学 |
| 传热学 | 大学化学习题精解 | 人体解剖与生理学 |
| 近代物理学 | 电路 | |

ISBN 7-03-010014-X



McGraw Hill

ISBN 7-03-010014-X/O·1568
定价：28.00 元

全美经典学习指导系列

# 量　子　力　学

〔美〕Y.皮莱格　R.普尼尼　E.扎阿鲁尔　著

邢泽仁　宁　铂　译

思　聪　审校

科学出版社

麦格劳-希尔教育出版集团

2002

## 内 容 简 介

本书讲解深入浅出,240多道详细解答的问题帮助学生打下牢固的基础.基础知识讲解清晰准确,大大减轻了学生学习的难度并增加了可记忆性.主要包括导论、数学预备知识、薛定谔方程及其应用、量子力学基础、谐振子、角动量、自旋、类氢原子、电磁场中的粒子运动、量子力学问题的解法、量子力学的数值方法、全同粒子、角动量、散射理论、辐射的半经典处理、数学附录.

本书适合自学,也宜于专业人员使用.

**Yoav Peleg, Reuven Pnini, Elyahu Zaarur: Schaum's Outline of Theory and Problems of Quantum Mechanics**

**ISBN: 0-07-054018-7**



**图字:01-2001-1764号**

**图书在版编目(CIP)数据**

量子力学/〔美〕Y.皮莱格等著;邢泽仁,宁铂译,思聪审校.—北京:科学出版社,2002.2

(全美经典学习指导系列)

ISBN 7-03-010014-X

Ⅰ.量… Ⅱ.①皮…②邢…③宁…④思… Ⅲ.量子力学-高等学校-习题 Ⅳ.O413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第005036号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

http://www.sciencep.com

双青印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2002年3月第 一 版 开本:A4(890×1240)

2002年3月第一次印刷 印张:18 3/4

印数:1—4 000 字数:537 000

**定价: 28.00元**

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

# 序　言

毫无疑问,量子力学是物理学最重要而又最难学的一个分支,它是我们用最现代的观点理解物质世界的基础.

现在,有许多很好用的量子力学教科书可以买到,每一种都有自己的特色和方法.本书的方法是提供给初学者大范围的有充足选择余地的问题和解答,这些问题和解答覆盖了量子力学导论性课程的所有主要方面.特别着重之处放在给出基本概念和结果.学好量子力学导论的部分任务涉及到掌握正规的(数学的)方法,这是因为要想有能力进入更高级的专题,掌握正规方法是完全必要的.我们努力给出能表明量子力学在解决实际问题时有应用价值的题目.我们还发现,由于计算机已成为应用物理学家的重要工具,编入数值方法一章是非常有益的.

我们渴望感谢对本书的完成有贡献和帮助的下列人员:

Uri Onn 博士、Zhair Millad 硕士、Moran Furman 硕士和 Arga Bart 硕士.

我们希望本书将帮助量子力学的初学者克服最初的困难,掌握好这一令人神往而又重要的学科.

Y.皮莱格
R.普尼尼
E.扎阿鲁尔

14

# 目　录

# 第一章 导 论

## 1.1 电磁辐射的粒子性

牛顿认为光是粒子束.在19世纪,关于光的干射和衍射的一些实验证明了光的波动性.后来,光学被纳入电磁理论,并证实光是一种电磁辐射.然而,直到19世纪末仍在研究的黑体辐射现象无法在电磁理论的框架内得到解释.1900年,普朗克得到一个解释黑体辐射的公式,后来证实这个公式可以从电磁辐射的量子化假设推导出来.

1905年,推广普朗克的假说时,爱因斯坦提议,回到光的粒子理论.他断言:频率为 $\nu$ 的光束由光子组成,每个光子具有能量 $h\nu$,这里 $h = 6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$(普朗克常数),爱因斯坦指出了为什么引入光子就能解释尚未理解的光电效应特性.大约20年后,证实了光子作为特殊的实物的确是存在的(康普顿效应,参看问题1.3).

光电效应是赫兹在1887年发现的,它是使电子逃离金属表面的几种物理过程之一.图1-1给出了研究光电效应所用装置的框图.

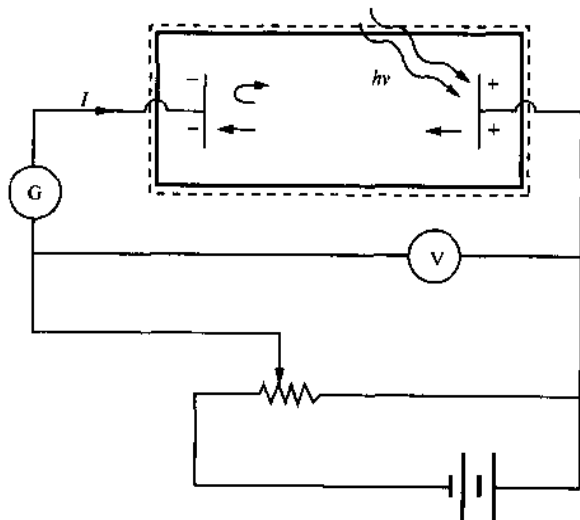



图 1-1

使得 $e\nu_0 = E_{\max}$(从阳极发射出的电子的最大能量)的临界电压 $V_0$ 被称为截止电压.光电效应的实验结果汇总在图1-2中.

(a) 当光照射在金属表面时,即使光强很弱,电流也几乎是同时产生.

(b) 对于固定的频率和阻滞电势,光电流和光强成正比.

(c) 对于不变的频率和光强,光电流随阻滞电压 $V$ 的增加而减小.直到最后当 $V = V_0$ 时变为零.

(d) 对于任何给定的金属表面,截止电压 $V_0$,依赖于光的频率但和光强无关.对于每一种金属,都有一个阈值频率 $\nu_0$,只有频率大于 $\nu_0$ 的光才能产生光电子发射;即无论光强多大,除非 $\nu > \nu_0$,都不会有电子从金属表面射出.

截止电压和光频之间的实验关系可以用

$$eV_0 = h\nu - h\nu_0 \tag{1.1}$$

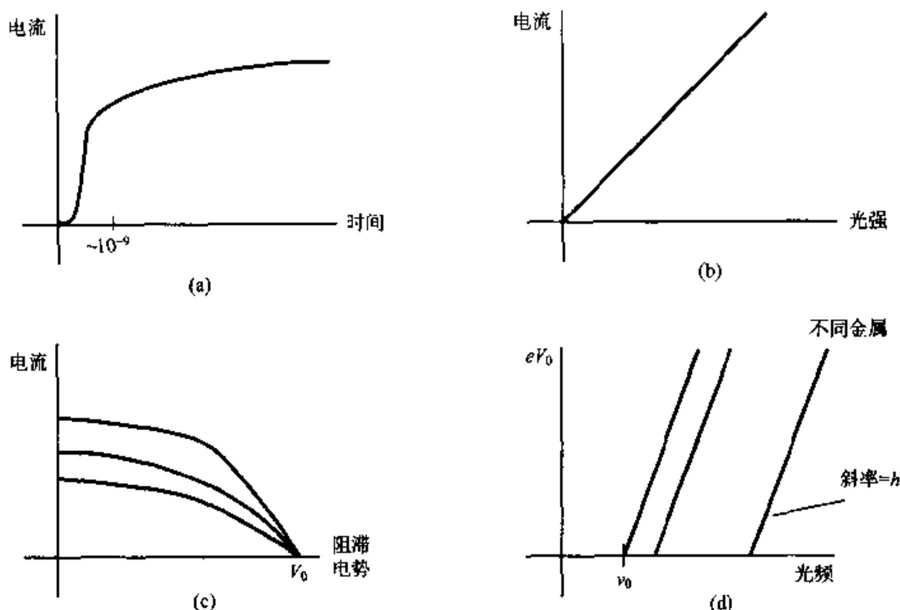



图 1-2

表示,这里 $h$(普朗克常数)对所有金属都是相同的.

## 1.2　光的二象性

双缝实验例 1.4 表明,如果只考虑光的两个特性之一——波动性或粒子性—就无法解释实验结果.光的行为同时地既像波又像粒子流;波动性使我们能计算粒子出现的概率.粒子的动力学参数(能量 $E$ 和光子动量 $\mathbf{P}$)和波动参数(频率 $\nu$ 和波矢 $\boldsymbol{k}$)是关联的,表达式为

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \end{cases} \tag{1.2}$$

这里 $\hbar = h/2\pi$.这就是普朗克-爱因斯坦关系.

## 1.3　实物粒子的二象性

在发现光子的同时代,观察到原子物理的一个基本现象.发现一种原子只发出或吸收确定频率的光.这一事实可以用如下的假设得到解释,即原子的能量只能取确定的离散值.这种离散能级的存在由 Frank-Hertz 用实验证实.玻尔在 1913 年用电子轨道的术语对此进行了解释,并提出如下的氢原子模型.

电子在限定的轨道上运动,限制条件为角动量必须是 $h/2\pi$ 的整数倍.对于半径为 $r$ 的圆形轨道,电子的速度由

$$mvr = \frac{nh}{2\pi}, \quad n = 1,2,\cdots \tag{1.3}$$

给出,库仑力和离心力之间的关系可以写成如下形式:

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{m\nu^2}{r} \tag{1.4}$$

这里 $-e$ 是电子电荷,我们假定核质量是无限大.联立(1.3)和(1.4)我们得到

$$v_n = \frac{2\pi e^2}{nh} \tag{1.5}$$

和

$$r_n = \frac{1}{4\pi^2}\frac{n^2h^2}{me^2} \tag{1.6}$$

能量是

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{e^2}{r} = \frac{2\pi^2 me^2}{n^2h^2} \tag{1.7}$$

玻尔假设,这些轨道上的电子虽然有加速度,但绝不产生辐射,它们处在定态.电子可以从一个允许轨道到另一个做不连续跳跃.能量的变化将以辐射方式体现出来,辐射频率为

$$\nu = \frac{E - E'}{h} \tag{1.8}$$

玻尔模型的物理基础到1923年仍不清楚,那一年德布罗意将假设向前推进一步,提出实物粒子具有波动特性;能量为 $E$、动量为 $\boldsymbol{p}$ 的粒子和角频率 $\omega = E/\hbar$ 波矢 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$ 的波相关联,因而相应的波长是

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = h/p \tag{1.9}$$

这就是德布罗意关系.

### 1.4 波包和测不准关系

电磁辐射和实物粒子的波动性和粒子性可以用波包的概念统一起来.波包是波的叠加.我们可以构筑一个波列,波列中的波在一个给定的空间区域外面相互干涉几乎完全消失.于是我们得到一个局部的波包,可以当成一个经典粒子的近似描述.由平面波叠加形成的波包可以写成

$$f(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int g(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}d\boldsymbol{k} \tag{1.10}$$

或者,在一维情况写成

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} g(x)e^{ikx}dk \tag{1.11}$$

波包的展开式由薛定谔方程确定(参看第三章).当按照量子力学的假设(参看第四章)将波包展开时,曲线 $f(x)$ 和 $g(k)$ 的宽度要满足关系式

$$\Delta x\Delta k > 1 \tag{1.12}$$

引用德布罗意关系 $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$,我们有

$$\Delta p\Delta x > \hbar \tag{1.13}$$

这就是海森伯测不准关系;如果我们试图在空间构筑高度局域化的波包,那么与之相连的动量就不能精确.反之亦然,将波包的动量精确限制在一个很窄的范围内,那么波包的空间范围就势必变得很宽.注意,因为 $\hbar$ 很小,经典物理的观念只在微观体系失效(参看习题1.4和1.5),测不准关系的作用是将实物粒子和辐射的波粒二象性统一起来.

考虑波包时,应当弄清楚相速度和群速度的区别.角频率为 $\omega = 2\pi\nu$ 波数为 $k = 2\pi/\lambda$ 的波,其相速度是

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \lambda\nu \tag{1.14}$$

相速度是相位不变的点在空间传播的速率.当具有不同频率和不同相速度的一系列波合成,在一个区域发生很强的相长干涉时,群速度是该区域前进的速度,它和分量波的角频率 $\omega$ 和波数 $k$ 有关.其关系式为

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \tag{1.15}$$

## 例题解答

**1.1** 考虑1.1节描述的光电效应的四个实验结果.对于每一个结果,讨论它是不是电磁波经典性质所预期的结果.我们分别讨论图1-2给出的每一个效应.

**解** (a) 电子逃逸金属表面是由于光束提供给它一份结合能.因为电磁辐射的连续性,我们预期金属表面吸收的能量将正比于光束强度(单位时间单位面积的入射能量),正比于照射面积,正比于照射时间.简单的计算(参看习题1.11)表明,在光强为 $10^{-10}\text{W/m}^2$ 情况下,预期在100小时后才有光电子发射.实验表明,对相同的光强观测到的时间延迟不超过 $10^{-9}$s.因而经典理论无法解释阳极上电子发射的瞬时性.

(b) 随着照射光能量的增加,阳极上电子吸收的能量也增加.因而,经典理论预言:射出电子的数目(从而电流)将随光强成正比地增加.这里,经典理论能够解释实验结果.

(c) 这一结果表明射出电子的能量存在一个分布,在经典理论框架内,该分布本身可能是起因于电子和金属结合程度的不同,或光束传递给电子的能量在数量上的变化,但事实是,这里存在一个截止电势,它和光强无关,这一点说明逸出电子的最大能量的确不依赖于单位时间达到金属表面的能量的多少.经典理论无法解译该实验结果.

(d) 按照经典观点,电子从阳极发射过程依赖于光的强度,而不依赖于光的频率.但是,实验上存在一个阈值频率,入射光频小于它,无论光强多大都没有光电子发射,该结果无法在经典理论框架内得到预言.

**1.2** 用爱因斯坦光量子化假说的观点解释光电效应的实验结果.像在问题1.1中一样,我们分别讨论图1-2给出的每一个结果.

**解** (a) 按照光由光子构成的假说,我们预期光子能够将其能量转移给金属中的电子.因而光电发射瞬时完成是合理的,既使在光强很弱的情况下,这一点和经典观念不同,经典观念认为电子发射依赖于从光吸收能量的连续积累.

(b) 从量子理论的观点考虑,光强等于单个光子的能量乘以单位时间穿过单位面积的光子数目.因而单位时间发射电子的数目(和电流等价)和光强成正比,是合理的.

(c) 电磁辐射的频率决定光子的能量 $h\nu$.因而,金属中电子靠吸收光获得能量,于是对任何给定的频率,光电子都有一个最大的动能,这就解释了图1.2中描述的效应.

(d) 如果我们假设电子的结合能,它是将电子紧紧束缚在金属上的最小能量,$\phi = h\nu$.方程1.1就得到简单的解释.出射电子的最大动能是 $h\nu - \phi$.应用截止电压的定义,$eV_0$ 是最大动能,因而 $eV_0 = h\nu - h\nu_0$.

**1.3** 考虑康普顿效应(图1-3).按照量子理论,频率为 $\nu$ 的电磁波束可以看作是粒子性光子束,每一个光子具有能量 $E = h\nu$ 和动量 $p = h\nu/c = h/\lambda$,这里 $\lambda$ 是波长.电磁辐射的散射变成光子和带电粒子的碰撞问题.假设沿 $x$ 轴运动的光子和质量为 $m_0$ 的粒子碰撞,碰撞的结果,光子以 $\theta$ 角被散射,其频率发生变化.找出作为散射角函数的光子波长的增量.

**解** 首先,粒子可能获得有意义的动能,我们必须以相对论动力学的方式来使用它,应用能量守恒我们得到

$$(\text{碰撞前})\quad \underbrace{h\nu}_{\text{光子}} + \underbrace{E_0}_{\text{粒子}} = \underbrace{h\nu^1}_{\text{光子}} + \underbrace{E}_{\text{粒子}}\quad(\text{碰撞后}) \tag{1.3.1}$$

这里 $E_0$ 是粒子的静止能量($E_0 = mc^2$).入射和散射光子的动量大小分别是

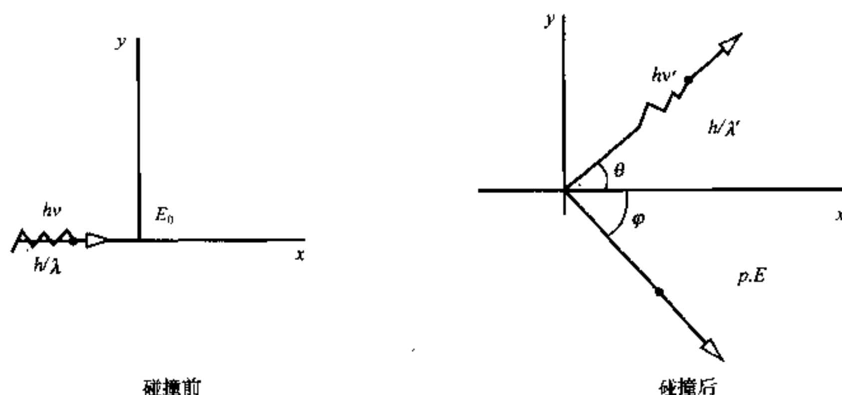



图 1-3

$$p_\lambda = \frac{h\nu}{c} = h/\lambda \quad 和 \quad p_{\lambda'} = \frac{h\nu'}{c} = h/\lambda' \tag{1.3.2}$$

散射角 $\theta$ 是 $\boldsymbol{p}_\lambda$ 和 $\boldsymbol{p}_{\lambda'}$ 之间的夹角.对图 1-4 的三角形应用余弦定理,我们有

$$p^2 = p_\lambda^2 + p_{\lambda'}^2 - 2p_\lambda p_{\lambda'}\cos\theta \tag{1.3.3}$$

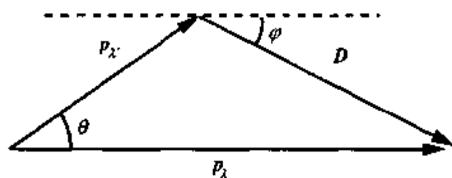



图 1-4

对于光子,考虑到 $pc = h\nu$,(1.3.3)的两边同时乘以 $c^2$,因而得到

$$h^2\nu^2 + h^2\nu'^2 - 2h^2\nu\nu'\cos\theta = p^2c^2 \tag{1.3.4}$$

应用(1.3.1)于是有

$$h\nu - h\nu' = E - E_0 \Rightarrow h^2\nu^2 + h^2\nu'^2 - 2h^2\nu\nu' = E^2 + E_0^2 - 2EE_0 \tag{1.3.5}$$

根据相对论,我们用 $E_0^2 + p^2c^2$ 代替 $E^2$,从(1.3.5)减去(1.3.4)得到

$$-2h^2\nu\nu'(1-\cos\theta) = 2E_0^2 - 2EE_0 \tag{1.3.6}$$

所以,应用(1.3.1)

$$h^2\nu\nu'(1-\cos\theta) = E_0(E-E_0) = m \cdot c^2(h\nu - h\nu') \tag{1.3.7}$$

我们看到$\frac{h}{mc^2}(1-\cos\theta) = \frac{\nu-\nu'}{\nu\nu'}c = \frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu} = \lambda' - \lambda$,因而波长的增量是

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc^2}(1-\cos\theta) \tag{1.3.8}$$

该式是康普顿效应的基本方程.

**1.4** 考虑一束光通过平行的双缝.当双缝的任何一条被封闭,在挡板后面屏幕上观察到典型的衍射花样(图 1-5).

当双缝同时打开,花样表示在图 1-6 中;在衍射轮廓线内呈现出干涉花样.注意,这个花样不是两个单缝衍射的叠加.这个现象能用经典粒子性光子解释吗?在这个实验装置中能说明光的粒子性吗?

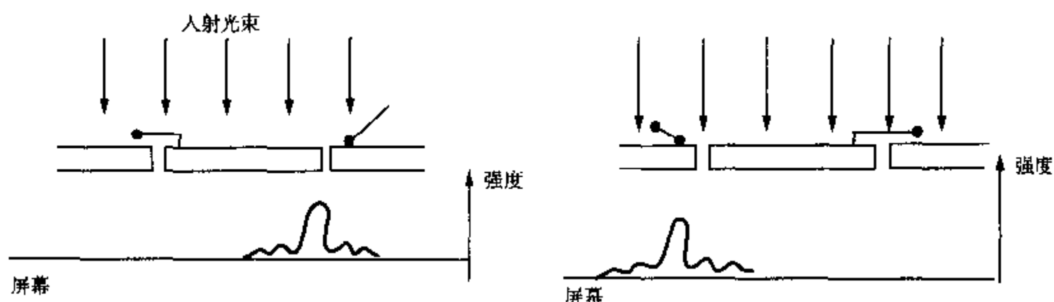



图 1-5

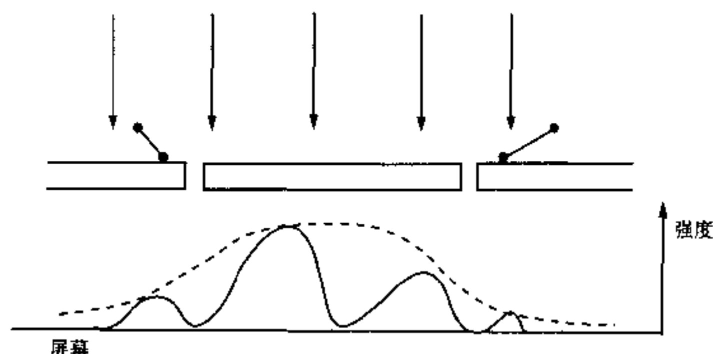



图 1-6

**解** 假设光束由质点式的经典粒子流构成，如果分别考虑任一个单个粒子，我们注意到，它必定穿过双缝的某一条.因而，当两缝同时打开时，我们得到的花样一定是分别打开每一条单缝所得花样的叠加.然而这种结果在实验中从未观察到.实际得到的花样只能用光同时通过双缝发生干涉来解释.

另外，在这个系统还可以观察到光的粒子性.如果光强很弱，达到屏幕的光子数增加得很慢.如果把照相底版置于屏幕位置，花样逐时逐点地慢慢成形.这表明光子一个一个地分别达到屏幕.注意，不可能决定这些光子的哪一个通过哪条窄缝.这种测量将毁坏干涉图样.

**1.5** 图 1-7 简略地描述一个实验装置，其目的是测量单个电子的位置.具有精确动量 $p_x$ 的电子束沿 $x$ 轴的正方向运动，与沿 $x$ 轴负方向照射的光发生散射.一个确定的电子将散射一个确定的光子，光子通过显微镜探测.

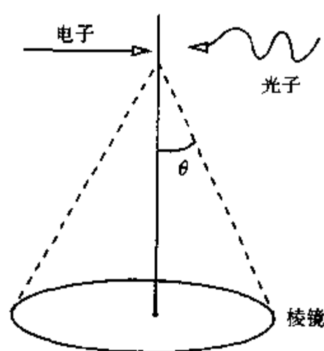



图 1-7

**解** 根据光学理论，测量电子位置的精确度是

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin\theta} \tag{1.5.1}$$

这里 $\lambda$ 是光的波长.实验表明如果我们想减小 $\lambda$ 使 $\Delta x$ 减到最小，这样做的结果是损失电子动量 $x$ 分量的信息.

根据量子理论，散射光也由光子组成，每个光子具有动量 $h\nu/c$.散射后的光子方向在棱镜孔径张角 $2\theta$ 范围内无法确定.因此，光子动量的 $x$ 分量不确定度为

$$\Delta p_x \sim 2\frac{h\nu}{c}\sin\theta \tag{1.5.2}$$

所以

$$\Delta x \Delta p_x \sim \frac{2h\nu}{c}\sin\theta \cdot \frac{\lambda}{\sin\theta} \sim 4\pi\hbar \tag{1.5.3}$$

如果我们试图通过测量屏幕的反冲以便更精确地测定光子动量的 $x$ 分量的办法来克服这一困难，但是我们不要忘记，一旦将显微镜作为整个观测系统的一部分，还必须考虑它的位置.显微镜本身必须遵从测不准关系，如果其动量被精确测定，其位置的测定势必降低精确度.所以，这个装置给不出违反测不准关系的机会.

**1.6** 证明当 $n$ 很大且只涉及小量子数跃迁时，玻尔氢原子与经典情况吻合.

**证**　我们来计算在相邻的两个态 $n_k = n$ 和 $n_l = n-1$ 之间跃迁所发射的光子的频率，这里 $n \gg 1$. 定义 Redberg 常数 $R = \dfrac{2\pi^2 me^4}{h^3 c}$，于是有，$E_k = \dfrac{ch}{n_k^2}R$ 和 $E_l = \dfrac{ch}{n_l^2}R$. 因而发射光子的频率为

$$\nu = \frac{n_k^2 - n_l^2}{n_k^2 n_l^2} cR = \frac{(n_k + n_l)(n_k - n_l)}{n_k^2 n_l^2} cR \tag{1.6.1}$$

$n_k - n_l = 1$，对于 $n \gg 1$，于是我们有

$$n_k + n_l \cong 2n, n_k^2 n_l^2 \cong n^4 \tag{1.6.2}$$

所以 $\nu \cong 2cR/n^3$. 根据电磁学的经典理论，以频率 $f$ 旋转的电荷将发出频率为 $f$ 的辐射. 另一方面，应用玻尔氢原子模形，电子绕核的轨道频率

$$f_n = \frac{v_n}{2\pi r_n} = \frac{4\pi^2 me^4}{n^3 h^2} \tag{1.6.3}$$

或　$f_n = 2cR/n^3$，该结果和跃迁光子的频率 $\nu$ 完全相同.

**1.7** 证明测不准关系迫使我们放弃半经典玻尔氢原子模型.

**证**　在玻尔模型中，我们将电子作为经典粒子处理. 容许轨道由量子化规则确定：圆形轨道半径 $r$ 和电子绕核转动的动量 $p = mv$ 必须满足 $pr = n\hbar\ (n = 1, 2, \cdots)$，以经典观点考虑电子的运动，当比较 $r$ 和 $p$ 时必须忽略位置和动量的不确定性，换句话说，$\Delta x \ll r$，$\Delta p \ll p$. 这意味着

$$\frac{\Delta x}{r}\frac{\Delta p}{p} \ll 1 \tag{1.7.1}$$

另一方面，不确定关系

$$\frac{\Delta x}{r}\frac{\Delta p}{p} \geqslant \frac{\hbar}{rp} \Rightarrow \frac{\Delta x}{r}\frac{\Delta p}{p} \geqslant \frac{1}{n} \tag{1.7.2}$$

于是，除非 $n \gg 1$，否则(1.7.1)式和(1.7.2)式矛盾.

**1.8** (a)考虑一个热中子，其速度 $v$ 相应于温度 $T = 300\text{K}$ 时的平均热运动能量. 这样的中子束落在晶体上有可能观测到衍射图样吗？

(b) 在大加速器中，供给一个电子的能量超过 $1\ \text{GeV} = 10^9\text{eV}$，这种电子相应的德布罗意波波长是多少？

**解**　(a) 绝对温度 $T$ 下的平均热运动能量是 $E_{av} = \dfrac{3}{2}kT$，这里 $k$ 是 Boltzmann 常数 ($k = 1.38 \times 10^{-23}\text{J/K}$)，因此，我们有

$$\frac{1}{2}m_n v^2 = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{3}{2}kT \tag{1.8.1}$$

根据德布罗意关系，相应的波长是

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m_n kT}} \tag{1.8.2}$$

当 $T = 300\text{K}$，我们有

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{3 \times 1.67 \times 10^{-27} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}} \cong 1.4(\text{Å}) \tag{1.8.3}$$

这是晶体中原子间隙大小的数量级，因而衍射现象和 X 射线相似.

(b) 我们注意,电子的静止能量是 $m_ec^2 \cong 0.5\times10^6$eV.因而,如果 $10^9$eV 的能量给予电子,它将以接近光速的速度运动,所以必须用相对论动力学予以处理.相应的波长 $\lambda = h/p$ 仍有效,但我们有 $E = \sqrt{p^2c^2 + m_ec^2}$.在本例题中,$m_ec^2$ 和 $E$ 相比可以忽略,我们得到

$$\lambda \cong \frac{hc}{E} = \frac{6.6\times10^{-34}\times3\times10^8}{1.6\times10^{-10}}\text{m} = 1.2\times10^{-15}\text{m} = 1.2\text{fm} \tag{1.8.4}$$

将电子加速到这样大的能量,就可以探测原子核的结构.

**1.9** 波导中波长和频率的关系为

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}} \tag{1.9.1}$$

用光速 $c$ 和相速度 $\nu_p = \lambda\nu$ 表示群速度

**解答**　首先,我们找出角频率对波数 $k$ 的依赖关系.我们有 $\omega = 2\pi\nu$,于是应用(1.9.1)我们有

$$\omega(k) = 2\pi\sqrt{\frac{c^2}{\lambda^2} + \nu_0^2} = 2\pi\sqrt{\frac{c^2k^2}{4\pi^2} + \nu_0^2} \tag{1.9.2}$$

所以,群速度为

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{2\pi}{2\sqrt{\frac{c^2k^2}{4\pi^2} + \nu_0^2}}\cdot\frac{2kc^2}{4\pi^2} = \frac{c^2k}{2\pi\nu} = \frac{2\pi}{\lambda}\frac{c^2}{2\pi\nu} = \frac{c_2}{\lambda\nu} = \frac{c^2}{v_P} \tag{1.9.3}$$

## 补 充 习 题

**1.10** 参照习题 1.9,求出群速度:

(a) $v = \sqrt{\frac{2\pi T}{\rho\lambda^3}}$(浅水中的水波,$T$ 是表面张力,$\rho$ 是密度)

(b) $v = \sqrt{\frac{g}{2\pi\lambda}}$(深水中的水波)

**答案**　(a) $v_g = \frac{3}{2}v_p$;(b) $v_g = \frac{1}{2}v_p$.

**1.11** 设强度为 $10^{-10}$W/m$^2$ 的光垂直照射到金属表面,原子间距近似为 3Å,每个原子有一个自由电子.金属表面的电子结合能是 5eV.假设照射在表面上的光均匀分布,且其能量被表面电子吸收,如果入射辐射当做经典波处理,光束打开直到电子获得足够的能量作为光电子释放出来要多长时间?

**答案**　大约 2800 年.

**1.12** 强度为 $I$、频率为 $\nu$ 的单色光束照射到完全吸收表面上,设光垂直入射到表面.应用经典电磁理论,可以证明表面受到辐射压强的作用.该压强和光强有关 $p = I/c$.根据量子理论观点,该关系式仍有效吗?

**答案**　有效.$p = \frac{h\nu}{c}N$,这里 $N$ 是光子束流量.

**1.13** 单色光被电子散射,使用例题 1.3 的结果,求当散射角是 90°时,波长的变化量.在可见光区域(比如说,$\lambda = 4000$Å)波长的相对增量是多大? 对 $\lambda = 1$Å 的 X 射线波长相对增量是多大?

**答案**　$\Delta\lambda = \frac{1}{m_0c}(1-\cos\theta) = 0.0243$Å,对于 $\lambda = 4000$Å,相对增量是百分之 0.006;对 $\lambda = 1$Å,相对增量是百分之 2.

**1.14** 我们希望证明实物粒子的波动性对于宏观物质世界是不相干的.例如取一个直径 1μm 和质量 $m = 10^{-15}$kg的小微粒,如果其速率是 1mm/s 计算相应的德布罗意波长.

**答案**　$\lambda = 6.6\times10^{-6}$Å.

**1.15** 考虑线度为 10Å 的一个病毒,假设其密度和水的密度相等(g/cm$^3$)并位于和其线度近似相等的区域,求病毒的最小速率.

**答案**　$v_{min} \approx 1$m/s.

# 第二章　数学预备知识

## 2.1　复域 $C$

复数域记为 $C$ 是由复数 $a+bi$ 生成的域.这里 $a$ 和 $b$ 是实数,而 i 是方程 $x^2+1=0$ 的一个解,即 $i=\sqrt{-1}$.如果 $z=a+bi$,那么 $a$ 称为 $z$ 的实部并用 $\mathrm{Re}(z)$ 表示;$b$ 称为 $z$ 的虚部并用 $\mathrm{Im}(z)$ 表示.$z=a+bi$ 的复数共轭是 $a-bi$,用 $\bar{z}$ 表示.复数的加法和乘法以如下的方式给出:

$$(a+bi)+(c+di)=(a+c)+(b+d)i \tag{2.1}$$

$$(a+bi)(c+di)=(ac-bd)+(bc+ad)i \tag{2.2}$$

如果 $z\neq 0$,我们定义 $W$ 和 $z$ 的除法为

$$z^{-1}=\frac{\bar{z}}{z\bar{z}}=\frac{a}{a^2+b^2}+\frac{-bi}{a^2+b^2} \tag{2.3}$$

$$\frac{w}{z}=wz^{-1} \tag{2.4}$$

图 2-1 用平面上的点表示复数域.

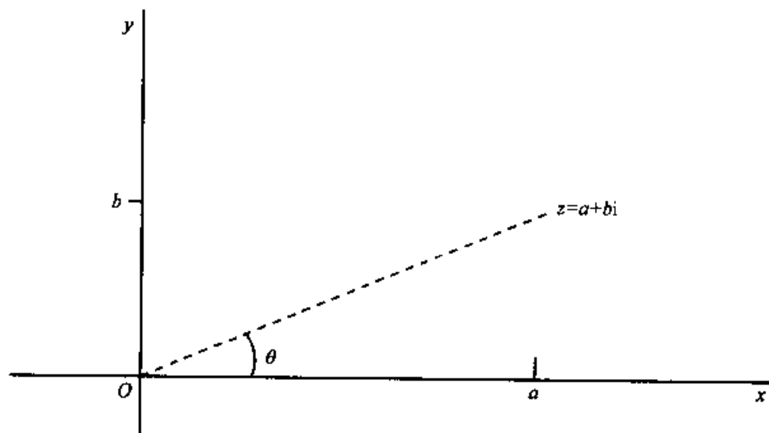



图 2-1

点 $z$ 和 $O$ 之间的距离为 $|z|=\sqrt{a^2+b^2}=\sqrt{z\bar{z}}$,并称之为 $z$ 的模.称 $\theta$ 角为 $z$ 的幅角,用 $\arg(z)$ 表示.因为平面上的点可以用极坐标,即一对数 $(r,\theta)$ 表示,这里 $r>0$ 及 $0\leqslant\theta<2\pi$,复数可以用模和幅角写出,因为容易证明:

$$a=r\cos\theta,\quad b=r\sin\theta \tag{2.5}$$

和

$$r=\sqrt{a^2+b^2},\quad \theta=\arctan\left(\frac{b}{a}\right)^{*} \tag{2.6}$$

---

* 此式是错误的,因为反正切的取值范围为 $\left[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right]$! 用几何方法不难给出不处在第一象限内的复数的幅角公式——译者注.

于是 $z=r(\cos\theta+\mathrm{i}\sin\theta)=r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$

## 2.2 C 上的矢量空间

$C$ 上的一个矢量空间是元素 $V$ 的一个集合,它在其元素(称为矢量)的加法(+)下是封闭的,并且对 $C$ 上的 $\alpha$、$\beta$ 和 $V$ 上的 $v$、$u$ 满足如下的条件:

1. $V$ 中含有一个独特的元素,记为 0,它满足

$$v+0=0+v=v \tag{2.7}$$

0 称为零矢量.

2. $\alpha v$ 也在 $V$ 中
3. $\alpha(v+u)=\alpha v+\alpha u$
4. $(\alpha+\beta)v=\alpha v+\beta v$
5. $(\alpha\cdot\beta)v=\alpha(\beta v)$
6. $0\cdot v=0,\alpha\cdot 0=0,1\cdot v=v$

一个重要的例子 $C^n$:考虑形为 $(z_1,z_2,\cdots,z_n)$ 的元素,这里 $z_i$ 是复数,我们定义这类元素的相加为

$$(z_1,z_2,\cdots,z_n)+(w_1,w_2,\cdots,w_n)=(z_1+w_1,z_2+w_2,+\cdots,z_n+w_n) \tag{2.8}$$

定义标量乘法为

$$z(z_1,z_2,\cdots,z_n)=(zz_1,zz_2,\cdots,zz_n) \tag{2.9}$$

可以证明,这些元素的集合具有复域 $C$ 上矢量空间的所有性质,这一重要的矢量空间记为 $C^n$.

一些有用的定义:$V$ 中的矢量 $u_1,\cdots,u_n$ 的集合覆盖 $V$,如果 $V$ 上的元素可以写成 $u$ 的线性组合,即

$$v=a_1u_1+a_2u_2+\cdots+a_nu_n \tag{2.10}$$

这里 $a_1$、$a_2$、$\cdots$、$a_n$ 是复数.如果 $a_1u_1+a_2u_2+\cdots+a_nu_n=0$ 意味着 $a_1=a_2=\cdots=a_n=0$ 就称矢量 $u_1$、$u_2$、$\cdots$、$u_n$ 是线性无关的.如果 $u_1$、$\cdots$、$u_n$ 是线性无关的,并且覆盖 $V$,它们被称为 $V$ 的基.数 $n$ 称之为 $V$ 的维数.假设 $W$ 是矢量空间 $V$ 中的一个矢量集合.如果:(1)对于 $W$ 中的每个 $v$、$w$,$v+w$ 仍在 $W$ 中,(2)对 $W$ 中的每个 $w$ 和每个标量 $\alpha$,$\alpha v$ 仍在 $W$ 中,$W$ 就称 $V$ 的一个子空间.

## 2.3 线性算符和矩阵

线性算符:令 $V$ 是复数 $C$ 上的矢量空间,映射 $T:V\rightarrow V$ 是 $V$ 上的一个算符,如果对 $C$ 上任意的 $\alpha$、$\beta$ 和 $V$ 上任意的 $u$、$v$,它都满足如下的条件:

$$T(\alpha v+\beta u)=\alpha T(v)+\beta T(u) \tag{2.11}$$

对 $V$ 上的任意 $u$,如果 $T$ 和 $S$ 是线性算符,它们的和线性算符 $T+S$ 定义为

$$(T+S)(u)=T(u)+S(u) \tag{2.12}$$

同样,对 $V$ 上的任意 $v$,我们用

$$(TS)(v)=T[S(v)] \tag{2.13}$$

定义两个线性算符的乘积.现在,我们只限于讨论有限维的矢量空间.因此,定义了加法和乘法运算的线性算符的集合就是复域上的一个代数.

假定 $e_1$、$e_2$、$\cdots$、$e_n$ 是 $V$ 的基,令 $T$ 是 $V$ 上的线性算符.$T$ 作用于 $e_1$、$\cdots$、$e_n$,我们得到

$$T(e_1) = \alpha_{11}e_1 + \cdots + \alpha_{1n}e_n$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{2.14}$$
$$T(e_n) = \alpha_{n1}e_1 + \cdots + \alpha_{nn}e_n$$

这里 $\alpha_{ij}$ 是复数.现在我们定义对基 $e$ 的算符 $T$ 的矩阵表示

$$[T]_e = (\alpha_{ji}) = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} \cdots & \alpha_{n1} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} \cdots & \alpha_{n2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha_{1n} & \alpha_{2n} \cdots & \alpha_{nn} \end{bmatrix} \tag{2.15}$$

注意,线性算符的矩阵表示依赖于基的选择.对于无限维矩阵,可以像对有限维矩阵一样进行求和与相乘运算,虽然当涉及到无限维求和时,要注意收敛问题,在量子力学中,线性算符是非常重要的,在下一章我们即将看到,它们代表诸如能量、动量等物理量.

内积:$V$ 上的内积 $\langle u,v\rangle$ 是从 $V\times V$ 到复数域的一种运算.(即把 $V$ 上的每一对矢量映射为一个复数).对 $V$ 上的 $u$、$v$、$u'$ 和 $C$ 上的 $\alpha$,内积满足如下的条件:

(i) $\langle u,v\rangle=\overline{\langle v,u\rangle}$

(ii) $\langle u+u',v\rangle=\langle u,v\rangle+\langle u',v\rangle$

(iii) $\langle \alpha u,v\rangle=\alpha\langle u,v\rangle$

(iv) $\langle u,u\rangle>0$,如果 $u\neq 0$ (2.16)

定义了内积的矢量空间称为内积空间.

我们可以用内积来表述一些有用的定义.矢量 $v$ 的模是

$$\| v \| = \sqrt{\langle v,v\rangle} \tag{2.17}$$

如果 $\| v \|=1$,那么就说 $v$ 是单位矢量,也说 $v$ 被归一化了.

两个矢量 $u$ 和 $v$ 是正交的,如果

$$\langle u,v\rangle = 0 \tag{2.18}$$

一组矢量 $\{u_i\}$ 是正交的,如果任意一对两个不同的元素是正交的,即 $\langle u_i,u_j\rangle=0$,当 $i\neq j$.特别,一组元素是正交的,且每一个元素都是单位矢量,可合并写为

$$\langle u_i,u_j\rangle = \delta_{ij} \tag{2.19}$$

这里,$\delta_{ij}$ 是 Kronecker $\delta$ 函数,当 $i\neq j$ 时为 0,$i=j$ 时为 1.量子力学中经常使用的一个重要结果是 Cauchy-Schwartz 不等式,对所有矢量 $u$ 和 $v$ 都有

$$|\langle u,v\rangle| \leqslant \| u \| \cdot \| v \| \tag{2.20}$$

算符和标积:假设 $T$ 是 $V$ 上的线性算符,且 $V$ 是标积空间,可以证明有一个特别的线性算符,记为 $T^\dagger$,对 $V$ 上任意的 $u$、$v$,它满足

$$\langle Tu,v\rangle = \langle u,T^\dagger v\rangle \tag{2.21}$$

这个算符称为 $T$ 的共轭算符.如 $A=(\alpha_{ij})$ 是一个复数矩阵,$A^\dagger$ 被定义为 $A^\dagger=(\overline{\alpha_{ji}})$.即,它由 $\alpha_{ij}$ 交换哑指标并取复共轭构成.如果 $A$ 代表一个算符 $T$,那么 $A^\dagger$ 代表算符 $T^\dagger$,在这两种情况下使用同样的符号 $\dagger$.如果 $T=T^\dagger$,那么 $T$ 被称为厄米算符或自共轭算符.如果 $T=-T^\dagger$,那么 $T$ 称为反厄米算符.如果 $T$ 保持标积不变,即对 $V$ 上的任何 $u$、$v$,都有 $\langle Tu,Tv\rangle=\langle u,$

$v\rangle$,那么 $T$ 称为么正算符.如果 $TT^{\dagger}=T^{\dagger}T$,那么 $T$ 被称为正规算符.

## 2.4 本征矢量和本征值

令 $T$ 是 $V$ 上的线性算符.如果对 $V$ 上的某些 $v$,有 $Tv=\lambda v$,则复数 $\lambda$ 就称为 $T$ 的一个本征值(也称为特征值).矢量 $v$ 称为 $T$ 的属于 $\lambda$ 的本征矢量.对于矩阵有同样的定义.注意,如果 $V$ 的基由 $T$ 的本征矢量构成,那么和这组基相应的 $T$ 就表示为一个对角矩阵,对角矩阵不仅仅容易运算,也反映出物理系统的重要特征量,诸如能量量子等等.

特征多项式:假设给定线性算符 $T$,它在某组基下表示成矩阵 $A$. $T$ 的特征多项式定义为

$$\Delta(t)=\det(\lambda I-A) \tag{2.22}$$

这里 $\lambda$ 是参数(标量)而 $I$ 是单位矩阵. $T$ 的特征方程定义为

$$\Delta(t)=0 \tag{2.23}$$

这些表达式和基的选择无关.

下述结果提供寻找矩阵或算符本征值的方法:当且仅当:标量 $\lambda$ 是特征多项式的根时,即 $\Delta(\lambda)=0$,那么 $\lambda$ 就是算符 $T$ 的一个本征值.

如果 $A$ 是厄米矩阵或单位矩阵,那么就存在一个么正矩阵 $U$,使 $UAU^{-1}$ 成为对角矩阵(本定理将不予证明).还须注意的是:如果 $A$ 和 $B$ 是厄米矩阵,那么它们同时对角化的充分必要条件为:它们为对易矩阵,即 $AB=BA$(参看例题 2.13).这些概念具有重要的物理意义,将在第四章予以详细讨论.

## 2.5 傅里叶级数和傅里叶变换

傅里叶级数:考虑区间 $0<x<l$ 上的函数 $f(x)$.如果

$$\int_0^l |f(x)|^2 \mathrm{d}x \tag{2.24}$$

是有定义的(即收敛),那么函数 $f(x)$ 就称为平方可积的.可以证明所有这种函数的集合是一个无限维的矢量空间,记为 $L_2(0,l)$.可以对 $L_2(0,l)$ 定义内积

$$\langle f,g\rangle=\int_0^l f(x)\overline{g(x)}\mathrm{d}x \tag{2.25}$$

$L_2(0,l)$ 中的任意函数 $f(x)$ 都可以展开为傅里叶级数

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_n x}, \qquad k_n=\frac{2\pi}{l}n \tag{2.26}$$

根据这一关系,我们可以将函数 $e_n=\frac{1}{\sqrt{l}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_n x}$ 作为无穷维空间 $L_2(0,l)$ 的"基".该空间的任意函数(矢量)都可以展开成基矢量的线性组合.可以证明 $\{e_n\}$ 构成一组正交单位基,即 $\langle e_i,e_j\rangle=\delta_{ij}$.展开式中的系数 $f_n$ 称为傅里叶系数,用关系式

$$f_n=\frac{1}{l}\int_0^l f(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n t}\mathrm{d}t \tag{2.27}$$

求出,因为 $e_n$ 是周期函数,其周期为 $l$,因而不难证明上面给出的傅里叶展开对周期为 $l$ 的周期函数 $f(x)$ 也成立.

傅里叶变换:现在考虑定义在区间 $(-\infty,\infty)$ 上的函数 $f(x)$,它不一定是周期函数.我们可以想像 $f(x)$ 是一个近似的周期函数,其周期趋向 $\infty$.数 $k_n$ 越来越密,直到 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_n x}$ 变为连续函数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$.凭此直观分析有下述结果:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{ikx}dx \tag{2.28}$$

这里 $F(k)$由

$$F(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx \tag{2.29}$$

给出. $F(k)$和 $f(x)$互相被称为傅里叶变换. Parseval-Planeherel 公式表明函数 $f(x)$及其傅里叶变换 $F(k)$的模相等.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 dk \tag{2.30}$$

## 2.6　狄拉克 δ 函数

在第 2.3 节我们使用了 Kronecker δ 函数, 只要整数 $n$ 和 $m$ 相等, 它的值都是 1, 否则等于 0. 这里用一个连续函数模仿 Kroneker δ 函数, 这就是狄拉克 δ 函数. 定义该函数 $\delta_\varepsilon(x)$为

$$\delta_\varepsilon(x) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon}, & 当 \frac{-\varepsilon}{2} < x < \frac{\varepsilon}{2} \\ 0, & 当 |x| > \frac{\varepsilon}{2} \end{cases} \tag{2.31}$$

考虑任意函数 $f(x)$, 在 $x=0$ 有定义, 在区间$\left[-\frac{\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2}\right]$它的变化可以忽略. 如果 $\varepsilon$ 足够小, 于是我们有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)f(x)dx \approx f(0)\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)dx = f(0) \tag{2.32}$$

我们用 $\varepsilon \to 0$ 的极限

$$\lim_{\varepsilon \to 0}\left|\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x)f(x)dx\right| = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0) \tag{2.33}$$

来定义 δ 函数. 更一般地可以写出

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)f(x)dx = f(x_0) \tag{2.34}$$

容易验证 $\delta(x-y)=0$ 当 $x \neq y$ 时, 以及 $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y)dx = 1$ . 虽然我们使用 δ 函数的语言, 但在通常意义上它不是函数; 它实际上是一个更复杂的东西, 称之为分布(在 $x=y$ 点没有定义). 这就是说我们仅考虑它出现在积分号内的情况

$$f \to \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-y)dy \tag{2.35}$$

因为这是一个线性算符, 它将函数映射成数, δ 函数才被当成函数. δ 函数经常被用来描述位于三维欧氏空间 $\boldsymbol{r}_0=(x_0, y_0, z_0)$点的粒子, 定义 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$为

$$\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0) \tag{2.36}$$

δ 函数在整个空间的积分为 1, 表示粒子的存在. 另一方面当 $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{r}_0$时, δ 函数为零.

容易证明, 有关 δ 函数的下述结果成立:

1. $\delta(-x)=\delta(x)$
2. $\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)$

3. $x\delta(x-x_0)=x_0\delta(x-x_0)$

4. $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-y)\delta(y-z)\mathrm{d}y=\delta(y-z)$

δ 函数和傅里叶变换：δ 函数的变换是

$$\bar{\delta}(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-y)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky} \tag{2.37}$$

因而傅里叶逆变换给出

$$\delta(x-y)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-y)}\mathrm{d}k \tag{2.38}$$

## 例 题 解 答

**2.1** 复数 $z=a+b\mathrm{i}$ 的共轭是 $a-b\mathrm{i}$，记为 $\bar{z}$，证明：

(a) $z\bar{z}=|z|^2$；(b) $z+\bar{z}$ 是实数；(c) $\overline{z_1+z_2}=\bar{z}_1+\bar{z}_2$；(d) $\overline{z_1z_2}=\overline{z_1}\,\overline{z_2}$；(e) $|z_1z_2|=|z_1||z_2|$

**证** (a) $z\bar{z}=(a+b\mathrm{i})\cdot(a-b\mathrm{i})=a^2+b^2=|z|^2$

(b) $z+\bar{z}=(a+b\mathrm{i})+(a-b\mathrm{i})=2a$ 它是实的

(c) $\overline{z_1+z_2}=\overline{(a_1+b_1\mathrm{i})+(a_2+b_2\mathrm{i})}=\overline{(a_1+b_1)+(b_1+b_2)\mathrm{i}}$

$=(a_1+a_2)-(b_1+b_2)\mathrm{i}=(a_1-b_1\mathrm{i})+(a_2-b_2\mathrm{i})=\overline{z_1}+\overline{z_2}$

(d) $\overline{z_1z_2}=\overline{(a_1+b_1\mathrm{i})(a_2+b_2\mathrm{i})}=\overline{(a_1a_2-b_1b_2)+(a_1b_1+a_2b_1)\mathrm{i}}$

$=a_1a_2-b_1b_2-(a_1b_2+a_2b_1)\mathrm{i}=(a_1-b_1\mathrm{i})(a_2-b_2\mathrm{i})=\bar{z}_1\bar{z}_2$

(e) $|z_1z_2|^2=z_1z_2\,\overline{z_1z_2}=z_1z_2\bar{z}_1\bar{z}_2=z_1\bar{z}_1z_2\bar{z}_2=|z_1|^2|z_2|^2$

**2.2** 计算$\left(\frac{1+\mathrm{i}}{1-\mathrm{i}}\right)^5$.

**解** 方法 a： $\left(\frac{1+\mathrm{i}}{1-\mathrm{i}}\right)^5=\left[\frac{(1+\mathrm{i})(1+\mathrm{i})}{(1-\mathrm{i})(1+\mathrm{i})}\right]^5=\left[\frac{(1+\mathrm{i})(1+\mathrm{i})}{2}\right]^5=\left(\frac{2\mathrm{i}}{2}\right)^5=\mathrm{i}^5=\mathrm{i}$ (2.2.1)

方法 b： $\left(\frac{1+\mathrm{i}}{1-\mathrm{i}}\right)^5=\left[\frac{\sqrt{2}(\cos45^\circ+\sin45^\circ)}{\sqrt{2}(\cos45^\circ-\sin45^\circ)}\right]^5=\left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}}{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}}\right)^5$

$=(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/2})^5=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/2}=\cos90^\circ+\mathrm{i}\sin90^\circ=\mathrm{i}$ (2.2.2)

**2.3** 证明两个线性算符的和与积均是线性算符.

**证** 假设 $T$ 和 $S$ 是线性算符，于是有

$$(T+S)(u+\alpha v)\equiv T(u+\alpha v)+S(u+\alpha v)=T(u)+\alpha T(v)+S(u)+\alpha S(v)$$
$$=(T+S)(u)+\alpha(T+S)(v) \tag{2.3.1}$$

及

$$(T\cdot S)(u+\alpha v)\equiv T[S(u+\alpha v)]=T[S(u)+\alpha S(v)]$$
$$=T[S(u)]+\alpha T[S(v)]=(T\cdot S)(u)+\alpha(T\cdot S)(v) \tag{2.3.2}$$

**2.4** 设 $V$ 是一元函数空间，证明微商是线性算符.

**证** 我们定义 $V$ 到 $V$ 的映射$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(f)=f'(x)$$

应用微积分基础知识，我们有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(f+\alpha g)=[f+\alpha g]'=f'(x)+\alpha g'(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(f)+\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(g)$$

**2.5** 设 $V$ 是 $C^n$(即 $n$ 重复数 $\boldsymbol{a}=(a_1,\cdots,a_n)$ 的集合,这里 $a_i$ 是复数,证明

$$\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle = \sum_i a_i \bar{b}_i$$

是 $V$ 的一个标积.

**证明**　我们从检查标积所必须满足的四个条件着手

$$\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i\bar{b}_i = \overline{\sum_{i=1}^{n} \bar{a}_i b_i} = \overline{\langle \boldsymbol{b},\boldsymbol{a}\rangle} \tag{2.5.1}$$

$$\langle \boldsymbol{a}+\boldsymbol{a}',\boldsymbol{b}\rangle = \sum_{i=1}^{n}(a_i+a'_i)\bar{b}_i = \sum_{i=1}^{n} a_i\cdot\bar{b}_i + \sum_{i=1}^{n} a'_i\cdot\bar{b}_i = \langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle + \langle \boldsymbol{a}',\boldsymbol{b}\rangle \tag{2.5.2}$$

和

$$\langle \alpha\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle = \sum_{i=1}^{n}(\alpha a_i)\bar{b}_i = \alpha\sum_{i=1}^{n} a_i\bar{b}_i = \alpha\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle \tag{2.5.3}$$

最后

$$\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i\bar{a}_i = \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2 \tag{2.5.4}$$

只要一个 $a_i$ 不等于零,则 $\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle$ 大于零.

**2.6** 如果 $A$ 和 $B$ 是算符,证明(a)$(A^\dagger)^\dagger=A$;(b)$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$;(c)$A+A^\dagger$,$\mathrm{i}(A-A^\dagger)$,和 $AA^\dagger$ 是厄米算符.

**证明**　(a) 对 $V$ 中的任意 $u$ 和 $v$,有

$$\langle Av,u\rangle = \langle v,A^\dagger u\rangle = \overline{\langle A^\dagger u,v\rangle} = \overline{\langle u,(A^\dagger)^\dagger v\rangle} = \langle (A^\dagger)^\dagger v,u\rangle$$

于是我们得到 $A=(A^\dagger)^\dagger$

(b) 对 $V$ 中的任意 $u$ 和 $v$,有

$$\langle v,(AB)^\dagger u\rangle = \langle ABv,u\rangle = \langle Bv,A^\dagger u\rangle = \langle v,B^\dagger A^\dagger u\rangle \tag{2.6.1}$$

所以 $B^\dagger A^\dagger=(AB)^\dagger$

(c) 我们写出

$$(A+A^\dagger)^\dagger = A^\dagger+(A^\dagger)^\dagger = A^\dagger + A = A + A^\dagger \tag{2.6.2}$$

这里,我们应用共轭的和是和的共轭这一事实,$(A+B)^\dagger=A^\dagger+B^\dagger$,该事实容易验证.我们再应用(a)的结果

$$[\mathrm{i}(A-A^\dagger)]^\dagger = \bar{\mathrm{i}}(A-A^\dagger)^\dagger = -\mathrm{i}(A^\dagger-A) = \mathrm{i}(A-A^\dagger) \tag{2.6.3}$$

这里我们还使用了这样一个事实,复数的共轭与将其共轭作为算符是完全相同的,即 $z^*=\bar{z}$,最后,根据(b)有

$$(AA^\dagger)^\dagger = (A^\dagger)^\dagger A^\dagger = AA^\dagger \tag{2.6.4}$$

**2.7** 证明厄米算符的本征值是实数

**证明**　设 $\lambda$ 是 $T$ 的本征值,且 $T=T^\dagger$,对 $V$ 中的任意 $v$ 有

$$\lambda\langle v,v\rangle = \langle \lambda v,v\rangle = \langle Tv,v\rangle = \langle v,Tv\rangle = \langle v,\lambda v\rangle$$
$$= \overline{\langle \lambda v,v\rangle} = \bar{\lambda}\langle v,v\rangle \tag{2.7.1}$$

因为 $\langle v,v\rangle$ 是正实数($v\neq0$),于是有 $\lambda=\bar{\lambda}$,这样 $\lambda$ 是实数.因为这些本征值可以代表物理量,所以厄米算符本征值是实数就非常重要.

**2.8** 证明厄米算符属于不同本征值的本征向量是正交的.

**证明**　设 $Tv=\lambda v$　$Tu=\mu u$,这里 $\lambda\neq\mu$,　有

$$\lambda\langle v,u\rangle = \langle\lambda v,u\rangle = \langle Tv,u\rangle = \langle v,T^{\dagger}u\rangle = \langle v,Tu\rangle = \langle v,\mu u\rangle = \bar{\mu}\langle v,u\rangle \tag{2.8.1}$$

于是

$$(\lambda-\bar{\mu})\langle v,u\rangle = (\lambda-\mu)\langle v,u\rangle = 0 \tag{2.8.2}$$

(因为 $T$ 是厄米算符 $\bar{\mu}=\mu$),但 $\lambda-\mu\neq 0$,因此 $\langle v,u\rangle=0$ 即 $v$ 和 $u$ 正交.

**2.9** 证明厄米、反厄米和么正算符是正规算符.

**证明** 如果 $T=T^{\dagger}$ 于是 $TT^{\dagger}=T^{\dagger}T=T^2$.同样,如果 $T=-T^{\dagger}$,于是 $TT^{\dagger}=T^{\dagger}T=-T^2$,如果 $T$ 是么正算符,那么对 $V$ 中的任意 $u,v$,都有 $\langle Tu,Tv\rangle=\langle u,v\rangle$.应用共轭算符的定义,并取 $u=v$,我们得到

$$\langle u,u\rangle = \langle Tu,Tu\rangle = \langle u,TT^{\dagger}u\rangle \tag{2.9.1}$$

所以,对 $V$ 中的任意 $u$,都有

$$\langle u,(I-TT^{\dagger})u\rangle = 0 \tag{2.9.2}$$

因为 $I-TT^{\dagger}$ 是厄米算符,随之有 $I-TT^{\dagger}=0$(试证明之).这就完全证明了 $T$ 是正规算符.

**2.10** 令 $V$ 是非零平方可积单变量连续复函数的空间,对任意一对函数,定义

$$\langle f,g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\overline{g(x)}\mathrm{d}x \tag{2.10.1}$$

证明:对该定义,$V$ 是标积空间.

**证明** 我们必须核查如下的条件:

$$\langle f,g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\overline{g(x)}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\,\overline{f(x)}\mathrm{d}x = \overline{\langle g,f\rangle} \tag{2.10.2}$$

$$\langle f+f',g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}[f(x)+f'(x)]\,\overline{g(x)}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\overline{g(x)}\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\,\overline{g(x)}\mathrm{d}x = \langle f,g\rangle + \langle f',g\rangle \tag{2.10.3}$$

和

$$\langle \alpha f,g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\alpha f(x)\,\overline{g(x)}\mathrm{d}x = \alpha\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\overline{g(x)}\mathrm{d}x = \alpha\langle f,g\rangle \tag{2.10.4}$$

$$\langle f,f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|f(x)|^2\mathrm{d}x$$

因为 $f$ 是连续的且在一个邻域内 $f\neq 0$,其积分也不为零,因而 $\langle f,f\rangle\neq 0$

**2.11** 证明(a)对 $V$ 上的任意 $v$,如果 $\langle v,u\rangle=\langle v,w\rangle$ 则 $u=w$

(b) 如果 $T$ 和 $S$ 是 $V$ 中的两个线性算符,并对 $V$ 中的任意 $u$、$v$ 都满足 $\langle Tu,v\rangle=\langle Su,v\rangle$,那么 $T=S$.

**证明** (a) 条件 $\langle v,u\rangle=\langle v,w\rangle$ 意味着对 $V$ 中的任意 $v$ 都有 $\langle v,u-w\rangle=0$,特别地,如果 $v=u-w$,我们得到

$$\langle u-w,u-w\rangle = 0 \tag{2.11.1}$$

因而 $u-w=0$,即 $u=w$

(b) 根据(a),对 $V$ 中的任意 $v$、$u$ 条件 $\langle Tv,u\rangle=\langle Sv,u\rangle$ 都意味着 $Tv=Sv$ 即 $T=S$.

**2.12** 令 $A$ 和 $B$ 是厄米矩阵,证明:当且仅当 $AB=BA$ 时,$A$ 和 $B$ 可以同时对角化(即,对同一矩阵 $U$)

**证明** 设 $UAU^{-1}=D_1$,$UBU^{-1}=D_2$ 这里 $D_1$ 和 $D_2$ 是对角矩阵.所以

$$U(AB)U^{-1} = UAU^{-1}UBU^{-1} = D_1D_2 = D_2D_1 = UBU^{-1}UAU^{-1} = U(BA)U^{-1} \tag{2.12.1}$$

在上式两边右乘 $U$ 左乘 $U^{-1}$,我们得到 $AB=BA$.

反向的证明留给读者,这一结果在量子力学中是非常重要的.

**2.13** 证明么正算符本征值的模为 1.

**证明** 设 $T$ 是么正算符,令 $v\neq 0$ 是属于本征值 $\lambda$ 的本征矢量,于是

$$\langle v,v\rangle=\langle Tv,Tv\rangle=\langle\lambda v,\lambda v\rangle=\lambda\bar{\lambda}\langle v,v\rangle \tag{2.13.1}$$

所以

$$\lambda\bar{\lambda}=|\lambda|^2=1. \tag{2.13.2}$$

**2.14** 设 $f$ 是可积函数,(a)如果 $\lambda\neq0$ 是实数,且 $g(x)=f(\lambda x+y)$,证明

$$G(k)=\frac{1}{\lambda}e^{iky/\lambda}F\left(\frac{k}{\lambda}\right) \tag{2.14.1}$$

这里 $F$ 和 $G$ 分别是函数 $f$ 和 $g$ 的傅里叶变换.(b)证明如果 $xf$ 也是可积函数,那么 $F(k)$是可微函数,且

$$F[f'(x)]=F[-ixf(x)] \tag{2.14.2}$$

**证明** (a) 按定义

$$G(k)=\int_{-\infty}^{\infty}g(x)e^{-ikx}dx=\int_{-\infty}^{\infty}f(\lambda x+y)e^{-ikx}dx=\int_{-\infty}^{\infty}f(\lambda x+y)e^{(-ik/\lambda)(\lambda x+y)}e^{iky/\lambda}\frac{1}{\lambda}d(\lambda x+y)$$

$$=\frac{1}{\lambda}e^{iky/\lambda}\int_{-\infty}^{\infty}f(s)e^{-i(k/\lambda)s}ds=\frac{1}{\lambda}e^{iky/\lambda}F\left(\frac{k}{\lambda}\right) \tag{2.14.3}$$

(b) 考虑表达式

$$\frac{F(k+h)-F(k)}{h}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}f(x)e^{-ikx}\left(\frac{e^{ihx}-1}{h}\right)dx \tag{2.14.4}$$

取极限 $\lim_{h\to0}\left(\frac{e^{ihx}-1}{h}\right)=-ix$ 我们得到

$$F[f'(x)]=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}-ixf(x)e^{-ikx}dx=F[-ixf(x)] \tag{2.14.5}$$

**2.15** 证明(a) $F[\delta(x-x_0)]=F[\delta(x)]e^{-ikx_0}$;(b) $F[\delta(ax)]=\frac{1}{a}F\left[\delta\left(\frac{k}{a}\right)\right]$.

**证明** (a) 根据定义

$$F[\delta(x-x_0)]=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_0)e^{-ixk}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(z)e^{-izk}e^{-ix_0k}dz=F[\delta(x)]e^{-ikx_0} \tag{2.15.1}$$

(b) $$F[\delta(ax)]=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(ax)e^{-ixk}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{a}\delta(z)e^{-ikz/a}dz=\frac{1}{a}F\left[\delta\left(\frac{k}{a}\right)\right] \tag{2.15.2}$$

## 补　充　习　题

**2.16** 证明:复数的三角不等式,即 $|z_1+z_2|\leqslant|z_1|+|z_2|$

**2.17** 证明:矢量$(1,1,0)$,$(0,0,\sqrt{2})$和$(i,i,i)$在复数域上线性相关.

**2.18** 求出矩阵 $A=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$ 的本征值和本征向量.(提示:如果 $\lambda$ 是本征值,对某些 $v\neq0$ 有 $Av=\lambda v$,或$(A-I\lambda)=0$,这意味着行列式$|(A-\lambda I)|=0$,解此方程求 $\lambda$,然后代入并求 $v$.)

**答案** $\lambda_1=1, v_1=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \lambda_2=-1, v_2=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$.

**2.19** 证明:矩阵

$$T=\begin{pmatrix}\cos\theta&-\sin\theta\\ \sin\theta&\cos\theta\end{pmatrix} \tag{2.19.1}$$

是么正矩阵. 如果 $u=\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$是该平面上的矢量, $u\to Tu$ 的几何解释是什么?

**2.20** 证明:序列$\left\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}},\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin k\alpha,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin 2k\alpha,\cdots,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos k\alpha,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos 2k\alpha,\cdots\right\}$是正交规一化的.

**2.21** 考虑幂次小于或等于 $n$ 的多项式空间,我们可以将每个多项式

$$p(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n \text{ 作为 } C^{n+1} \text{ 的向量}(a_0,a_1,\cdots,a_n)$$

事实上,它是 $p(x)$对于基$\{1,x,\cdots,x^n\}$的表示,算符$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$对这些基的表示矩阵是什么?

**答案** $\begin{pmatrix}0&1&0&\cdots&0\\0&0&2&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\vdots&&\vdots\\0&0&0&\cdots&n\\0&0&0&\cdots&0\end{pmatrix}$

**2.22** 求出 $\mathrm{e}^{-x^2/2}$的傅里叶变换.

**答案** $F(t)=\mathrm{e}^{-k^2/2}$.

**2.23** (a) 求函数 $f(x)=\frac{\pi-x}{2}$, $(0\leqslant x\leqslant 2\pi)$的傅里叶级数;

(b) 应用(a)的结果,证明: $\frac{\pi}{4}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{2n+1}$.

**答案** (a) $\frac{\pi-x}{2}=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{-\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}nx^{n=0}}}{n}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\sin(nx)}{2n+1}$.

# 第三章　薛定谔方程及其应用

## 3.1　单粒子波函数

在量子力学中，单个粒子是用波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来描述的，它包含在时刻 $t$ 该粒子空间状态的有关信息. 波函数是三个直角坐标 $x, y, z$ 和时间 $t$ 的复函数. 波函数的解释如下：在时刻 $t$ 粒子出现在位于点 $\boldsymbol{r}$ 处的体积微元 $\mathrm{d}^3r=\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ 内的概率 $\mathrm{d}P(\boldsymbol{r},t)$ 是

$$\mathrm{d}P(\boldsymbol{r},t) = C|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3r \tag{3.1}$$

这里 $C$ 是归一化常数，在时刻 $t$，在空间各处找到粒子的总概率是 1，因而

$$\int \mathrm{d}P(\boldsymbol{r},t) = 1 \tag{3.2}$$

根据(3.1)和(3.2)我们结论如下：

(a) 波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 必须是平方可积的，即

$$\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3r \tag{3.3}$$

有定义

(b) 归一化常数由关系式

$$\frac{1}{C} = \int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3r \tag{3.4}$$

给出，当 $C=1$ 时，我们说波函数被归一化了. 波函数 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ 必须在空间各处有定义和连续*.

## 3.2　薛定谔方程

考虑质量为 $m$ 的粒子受势 $v(\boldsymbol{r},t)$ 的束缚，波函数随时间的变化遵从薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.5}$$

这里 $\nabla^2$ 是拉普拉斯算符 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$，注意薛定谔方程的两条重要性质.

(a) 薛定谔方程是 $\psi$ 的线性齐次方程. 因此，叠加原理成立. 即，如果 $\psi_1(\boldsymbol{r},t), \psi_2(\boldsymbol{r},t), \cdots, \psi_n(\boldsymbol{r},t)$ 是薛定谔方程的解，那么

$$\psi = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\psi_i(\boldsymbol{r},t)$$

也是方程的解.

(b) 薛定谔方程是时间的一阶方程，所以，时刻 $t_0$ 的状态决定其后所有时间的状态.

## 3.3　不含时势中的粒子

粒子受不含时势的束缚，其波函数满足薛定谔方程：

---

* 这个说法并不确切，实际上波函数可以在可列个点上没有定义——译者注.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.6}$$

做分离变数 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\chi(t)$,我们有 $\chi(t)=A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$($A$ 和 $\omega$ 均为常数),这里 $\phi(\boldsymbol{r})$必须满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r})=\hbar\omega\phi(\boldsymbol{r}) \tag{3.7}$$

这里 $\hbar\omega$ 是状态的能量$E$(参看例题 3.1),这就是定态的薛定谔方程,这里形为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}=\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{3.8}$$

的波函数称为薛定谔方程的定态解,因为在这种情况下,概率密度不依赖于时间[参看问题3.1(b)].设在时间 $t=0$,我们有

$$\psi(\boldsymbol{r},0)=\sum_n\phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{3.9}$$

这里 $\phi_n(\boldsymbol{r})$是定态解 $\psi_n(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n t}$的空间部分.在这种情况,根据叠加原理,$\psi(\boldsymbol{r},0)$时间演变由

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_n\phi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n t} \tag{3.10}$$

来描述.对于自由粒子,我们有 $V(\boldsymbol{r},t)\equiv0$,形为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{3.11}$$

的解满足薛定谔方程.这里 $A$ 是常数,$k$ 和$\omega$ 满足关系式$\omega=\hbar k^2/2m$,这种形式的解称为平面波.注意,因为这个 $\psi(\boldsymbol{r},t)$不是平方可积的,它们不可能严格地代表一个粒子.但在另一方面,平面波的叠加可以产生一个表达式,它是平方可积的,因而能描述粒于的动力学性质.形为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty}g(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega(\boldsymbol{k})t]}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k} \tag{3.12}$$

的波函数称为波包.我们经常研究一维波包

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}g(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kx-\omega(k)t]}\mathrm{d}k \tag{3.13}$$

### 3.4 波函数的标量积 算符

对于每一对波函数,我们用如下的定义将一个复数与它们联系起来:

$$(\phi,\psi)=\int\phi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r \tag{3.14}$$

这里$(\varphi,\psi)$是 $\varphi(\boldsymbol{r})$和 $\psi(\boldsymbol{r})$的标量积(参看第二章).

一个算符 $A$ 作用到波函数$\psi(\boldsymbol{r})$产生另一个波函数 $\psi'(\boldsymbol{r})$.如果这种对应是线性的,即对任意复数 $\alpha_1$ 和 $\alpha_2$,都有

$$A[\alpha_1\psi_1(\boldsymbol{r})+\alpha_2\psi_2(\boldsymbol{r})]=\alpha_1A\psi_1(\boldsymbol{r})+\alpha_2A\psi_2(\boldsymbol{r}) \tag{3.15}$$

那么算符 $A$ 就称为线性算符.有两组算符是非常重要的:

(a) 空间算符 $X$、$Y$ 和$Z$,定义为

$$\begin{cases}X\psi(x,y,z,t)=x\psi(x,y,z,t)\\Y\psi(x,y,z,t)=y\psi(x,y,z,t)\\Z\psi(x,y,z,t)=z\psi(x,y,z,t)\end{cases} \tag{3.16}$$

(b) 动量算符 $p_x$，$p_y$ 和 $p_z$，定义为

$$
\begin{cases}
p_x\psi(x,y,z,t) = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x}\psi(x,y,z,t) \\
p_y\psi(x,y,z,t) = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial y}\psi(x,y,z,t) \\
p_z\psi(x,y,z,t) = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial z}\psi(x,y,z,t)
\end{cases}
\tag{3.17}
$$

算符 $A$ 在态 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的平均值定义为

$$\langle A\rangle = \int\psi^*(\boldsymbol{r})[A\psi(\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3 r \tag{3.18}$$

均方差定义为

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} \tag{3.19}$$

这里 $A^2$ 是算符 $A\cdot A$

考虑称为粒子哈密顿量的算符，它被定义为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r},t) \equiv \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r},t) \tag{3.20}$$

这里 $p^2$ 是算符 $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ 的缩写. 应用该算符公式，薛定谔方程写成

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = H\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.21}$$

如果势能是时间无关的，定态解必须满足方程

$$H\phi(\boldsymbol{r}) = E\phi(\boldsymbol{r}) \tag{3.22}$$

这里 $E$ 是实数，称为态的能量. 方程(3.22)是算符 $H$ 的本征值方程，算符 $H$ 作用于本征函数 $\phi(\boldsymbol{r})$ 产生同样的函数乘以相应的本征值 $E$. 因而，容许的能量就是算符 $H$ 的本征值.

### 3.5 概率密度和概率流

考虑一个用归一化波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 描述的粒子，概率密度定义为

$$\rho(\boldsymbol{r},t) = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \tag{3.23}$$

在时刻 $t$，在位于 $\boldsymbol{r}$ 的无限小体积元 $\mathrm{d}^3 r$ 内找到粒子的概率 $\mathrm{d}P(\boldsymbol{r},t)$ 等于

$$\mathrm{d}P(\boldsymbol{r},t) = \rho(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3 r \tag{3.24}$$

$\rho(\boldsymbol{r},t)$ 对整个空间的积分在所有时间都保持常数. 注意，这并不意味着在任何点 $\boldsymbol{r}$ 处概率密度 $\rho(\boldsymbol{r},t)$ 一定是时间无关的. 更何况局部的概率守恒还可以用连续性方程的形式表示

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{3.25}$$

这里 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)$ 是概率流，定义为

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\hbar}{2m_i}[\psi^*(\nabla\psi) - \psi(\nabla\psi^*)] = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi\right)\right] \tag{3.26}$$

考虑空间被势阱，或势垒隔开的两个区域，这两个区域的势为常数，参看图 3-1.

我们定义透射和反射系数如下：假设粒子(或粒子流)从区域 $I$ 穿过势阱(或势垒)到达区域Ⅱ. 在一般情况，定态波函数将包括三个部分. 在区域Ⅰ，态由概率流为 $J_I$ 的入射波和概率

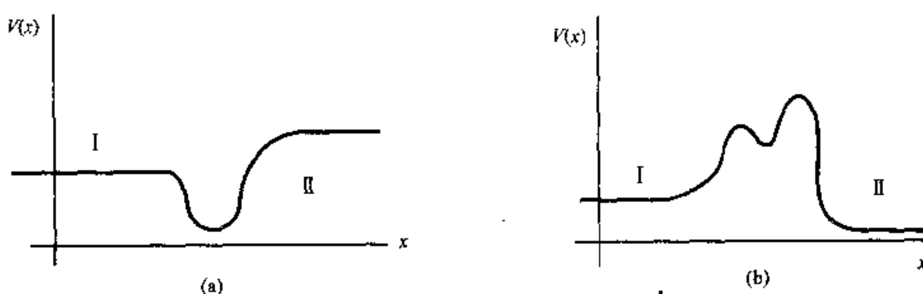



图 3-1　(a) 势阱;(b) 势垒

流为$J_R$ 的反射流组成.在区域Ⅱ有概率流为 $J_T$ 的透射波.

反射系数定义为

$$R = \left|\frac{J_R}{J_I}\right| \tag{3.27}$$

透射系数定义为

$$T = \left|\frac{J_T}{J_I}\right| \tag{3.28}$$

## 例　题　解　答

**3.1**　考虑一个粒子受不含时势 $V(\boldsymbol{r})$的束缚.(a) 设粒子的态用形为 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\chi(t)$的波函数描述.证明 $\chi(t)=Ae^{-i\omega t}$($A$ 是常数),而 $\phi(\boldsymbol{r})$必须满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r})=\hbar\omega\phi(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.1}$$

这里 $m$ 是粒子质量.(b) 证明(a)中薛定谔方程的解导致时间无关的概率密度.

**证明**：(a) 我们将 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\chi(t)$代入薛定谔方程

$$i\hbar\phi(\boldsymbol{r})\frac{d\chi(t)}{dt}=\chi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\boldsymbol{r})\right]+\chi(t)V(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.2}$$

在波函数不为零的区域,(3.12)两边同除以 $\phi(\boldsymbol{r})\chi(t)$,得到

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt}=\frac{1}{\phi(\boldsymbol{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\boldsymbol{r})\right]+V(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.3}$$

方程(3.13)的左边只是时间 $t$ 的函数,和 $\boldsymbol{r}$ 无关.另一方面,方程的右边仅是 $\boldsymbol{r}$ 的函数.因而(3.19)的两边既不依赖于 $\boldsymbol{r}$ 又不依赖于$t$,因而只能是常数,为方便令其等于 $\hbar\omega$,所以

$$i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt}=i\hbar\frac{d[\ln\chi(t)]}{dt}=\hbar\omega \tag{3.1.4}$$

于是

$$\ln\chi(t)=\int -i\omega dt=-i\omega t+C\Rightarrow\chi(t)=Ae^{-i\omega t} \tag{3.1.5}$$

这里 $A$ 是常数.将 $x(t)=Ae^{-i\omega t}$代入(3.13)$\phi(\boldsymbol{r})$必须满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r})=\hbar\omega\phi(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.6}$$

(b) 对于形为 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})e^{-i\omega t}$ 的波函数,概率密度由下式定义:

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=[\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}][\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}]^*=\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\phi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}=|\phi(\boldsymbol{r})|^2 \tag{3.1.7}$$

我们看到概率密度不依赖于时间,这就是我们这类解为"定态"的原因.

**3.2** 考虑两粒子一维系统两粒子质量为 $m_1$ 和 $m_2$,束缚两粒子的势仅依赖于两粒子之间的距离 $x_1-x_2$,哈密顿量为

$$H=\frac{p_1^2}{2m_1}+\frac{p_2^2}{2m_2}+V(x_1-x_2) \tag{3.2.1}$$

(a) 用新变数 $x$ 和 $X$ 写出薛定谔方程,这里

$$x=x_1-x_2(\text{相对距离}),X=\frac{m_1x_1+m_2x_2}{m_1+m_2}(\text{质心坐标}) \tag{3.2.2}$$

(b) 用分离变数法求质心和粒子相对距离变化所满足的方程.解释你的结果.

**解答**　以 $x_1$ 和 $x_2$ 为自变量,双粒子的波函数所满足的薛定谔方程为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x_1,x_2,t)}{\partial t}=H\psi(x_1,x_2,t)&=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2\psi(x_1,x_2,t)}{\partial x_1^2}\\&-\frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2\psi(x_1,x_2,t)}{\partial x_2^2}+V(x_1-x_2)\psi(x_1,x_2,t)\end{aligned} \tag{3.2.3}$$

为了变换到自变量 $x$ 和 $X$,我们必须用新变量表示微商 $\partial^2/\partial x_1^2$ 和 $\partial^2/\partial x_2^2$.我们有

$$\frac{\partial x}{\partial x_1}=1,\quad \frac{\partial x}{\partial x_2}=-1,\quad \frac{\partial X}{\partial x_1}=\frac{m_1}{m_1+m_2},\quad \frac{\partial X}{\partial x_2}=\frac{m_2}{m_1+m_2} \tag{3.2.4}$$

于是,对任意函数 $f(x_1,x_2)$,我们得到

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}=\frac{\partial f(x,X)}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_1}+\frac{\partial f(x,X)}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_1}=\frac{\partial f(x,X)}{\partial x}+\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial f(x,X)}{\partial X} \tag{3.2.5}$$

同样

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}=\frac{\partial f(x,X)}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_2}+\frac{\partial f(x,X)}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_2}=-\frac{\partial f(x,X)}{\partial x}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial f(x,X)}{\partial X} \tag{3.2.6}$$

或

$$\frac{\partial}{\partial x_1}=\frac{\partial}{\partial x_1}+\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X},\quad \frac{\partial}{\partial X}=-\frac{\partial}{\partial x}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X} \tag{3.2.7}$$

对 $x_1$ 和 $x_2$ 的二阶导数,有

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}&=\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\right)\\&=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x}+\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X^2}\end{aligned} \tag{3.2.8}$$

对于 $x_1$ 和 $x_2$ 两者,波函数必须是光滑的,于是我们可以交换微商次序并得到

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x} \tag{3.2.9}$$

对 $x_2$,我们有

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}=\left(-\frac{\partial}{\partial x}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\right)\left(-\frac{\partial}{\partial x}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\right)=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2\frac{\partial_2}{\partial X^2}-\frac{2m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x} \tag{3.2.10}$$

将(3.2.9)和(3.2.10)代入(3.2.3),我们得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,X,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi(x,X,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial X^2}-\frac{2m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi(x,X,t)+V(x)\psi(x,X,t)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\frac{\partial^2\psi(x,X,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,X,t)-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_1+m_2}\right)\frac{\partial^2}{\partial X^2}\psi(x,X,t) \tag{3.2.11}$$

(b) 因为哈密顿量是时间无关的,令 $\psi(x,X,t)=\phi(x,X)\chi(t)$(我们分离时间变数和空间变数,参看问题 3.1).定态部分 $\phi(x,X)$满足的方程是 $H\phi(x,X)=E_{total}\phi(x,X)$,这里 $E_{total}$是总能量.代入(3.2.11)我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\right)\frac{\partial^2\phi(x,X)}{\partial x^2}+V(x)\phi(x,X)-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{m_1+m_2}\right)\frac{\partial^2\phi(x,X)}{\partial X^2}=E_{total}\phi(x,X) \tag{3.2.12}$$

做分离变数 $\phi(x,X)=\xi(x)\eta(X)$,(3.2.12)变为

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\xi(x)}\left(\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\right)\frac{\partial^2\xi(x)}{\partial x^2}+V(x)=\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\eta(X)}\frac{1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\eta(X)}{\partial X^2}+E_{total} \tag{3.2.13}$$

方程(3.13)的左边仅依赖于 $x$,另一方面,方程的右边仅是 $X$ 的函数.因而方程的两边既不依赖 $x$ 也不依赖$X$,因而,两者只能等于一个常数.我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{\eta(X)}\frac{1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\eta(x)}{\partial X^2}=E_{cm} \tag{3.2.14}$$

仔细审查,就得到结论,(3.2.14)正是质量为 $m_1+m_2$ 的自由粒子的定态波函数所满足的方程,即

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{m_1+m_2}\frac{\partial^2\eta(x)}{\partial x^2}=E_{cm}\eta(x) \tag{3.2.15}$$

注意,相应于双粒子质心的波函数如同质量为 $m_1+m_2$ 能量为 $E_{cm}$的单个自由粒子波函数.这一结果完全和经典情况相似.回到(3.2.13),两粒子相对位置的方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}\right)\frac{\partial^2\xi(x)}{\partial x^2}+V(x)\xi(x)=E_{total}-E_{cm} \tag{3.2.16}$$

方程(3.2.16)规定了质量为$(m_1+m_2)/m_1m_2$、受势 $V(x)$束缚.并具有总能量 $E_{total}-E_{cm}$的粒子的定态波函数.因而两粒子的相对位置,其行为如同有效质量为$\frac{m_1+m_2}{m_1m_2}$,能量为 $E_{total}-E_{cm}$,被有效势能 $V(x)$束缚的单个粒子.这一结果也和经典情况相似.

**3.3** 考虑一个质量为 $m$ 的粒子被限制在有限的一维势阱 $V(x)$内;参看图 3-2.证明

(a) $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{\langle p\rangle}{m}$和(b)$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}=\left\langle-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle$,这里 $x$ 和 $p$ 分别是粒子坐标和动量的平均值,而$\left\langle-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle$是作用在粒子上的力的平均值.这一结果可以推广成另一类算符,并称为 Ehrenfest 定理.

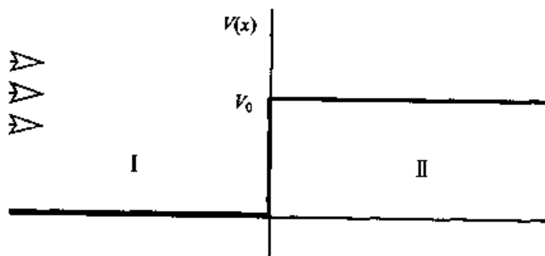



图 3-2

**证明**　假设适用于粒子的波函数为 $\psi(x,t)$.则薛定谔方程是

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\psi(x,t)}{\partial x^2}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x)\psi(x,t) \tag{3.3.1}$$

其共轭方程是

$$\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x)\psi^*(x,t)$$

[注,我们假设 $V(x)$是实函数]积分 $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\mathrm{d}x$ 必须是有限的,于是我们得到

$$\lim_{x\to\infty}|\psi(x,t)|^2=\lim_{x\to-\infty}|\psi(x,t)|^2=0,\quad \lim_{x\to\infty}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}=\lim_{x\to-\infty}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}=0 \tag{3.3.2}$$

所以$\langle x\rangle$的时间微商是

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}x\psi(x,t)\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\mathrm{d}x \tag{3.3.3}$$

将薛定谔方程及其共轭方程代入上积分给出

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2}x\psi(x,t)\mathrm{d}x+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)V(x)\psi(x,t)\mathrm{d}x\\&\quad+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\mathrm{d}x\right]-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)V(x)\psi(x,t)\mathrm{d}x\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\lim_{\xi\to\infty}\left[\int_{-\xi}^{\xi}\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2}x\psi(x,t)\mathrm{d}x-\int_{-\xi}^{\xi}\psi^*(x,t)x\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\mathrm{d}x\right]\end{aligned} \tag{3.3.4}$$

分部积分给出

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\lim_{\xi\to\infty}\left\{\left[\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}x\psi(x,t)\right]_{-\xi}^{\xi}-\int_{-\xi}^{\xi}\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}[x\psi(x,t)]\mathrm{d}x\right.\\&\quad\left.-\left[\psi^*(x,t)x\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right]_{-\xi}^{\xi}+\int_{-\xi}^{\xi}\frac{\partial}{\partial x}[\psi^*(x,t)x]\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\right\}\end{aligned} \tag{3.3.5}$$

应用(3.3.2),第一项和第三项等于零;于是,我们有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\lim_{\xi\to\infty}\left[-\int_{-\xi}^{\xi}\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\psi(x,t)\mathrm{d}x-\int_{-\xi}^{\xi}\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}x\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\right.\\&\quad\left.+\int_{-\xi}^{\xi}\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}x\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x+\int_{-\xi}^{\xi}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\right]\end{aligned} \tag{3.3.6}$$

最后,第一项分项分部积分给出

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\lim_{\xi\to\infty}\left[-\left[\psi^*(x,t)\psi(x,t)\right]_{-\xi}^{\xi}+2\int_{-\xi}^{\xi}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\right]\\&=\frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x=\frac{1}{m}\langle p\rangle\end{aligned} \tag{3.3.7}$$

(b) 考虑$\langle p\rangle$的时间微商:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{3.3.8}$$

因为 $\psi(x,t)$具有光滑导数,在第二项可以交换对时间和空间的求导次序.应用薛定谔方程,(3.3.8)变为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^{2*}\psi(x,t)}{\partial x^2}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\\&\quad+\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial^3\psi(x,t)}{\partial x^3}\mathrm{d}x-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}[V(x)\psi(x,t)]\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{3.3.9}$$

第一项分部积分给出

$$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \psi^*(x,t)}{\partial x^2} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} dx = \lim_{\xi\to\infty} \left\{ \left[ \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right]_{-\xi}^{\xi} - \int_{-\xi}^{\xi} \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} dx \right\} \tag{3.3.10}$$

应用(3.3.2),我们得到

$$I = \lim_{\xi\to\infty} \left[ -\int_{-\xi}^{\xi} \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} dx \right] \tag{3.3.11}$$

再次分部积分,给出

$$I = \lim_{\xi\to\infty} \left\{ -\left[ \psi^*(x,t) \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \right]_{-\xi}^{\xi} + \int_{-\xi}^{\xi} \psi^*(x,t) \frac{\partial^3 \psi(x,t)}{\partial x^2} dx \right\} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \frac{\partial^3 \psi(x,t)}{\partial x^2} dx \tag{3.3.12}$$

回到(3.3.9),最后我们有

$$\frac{d\langle p\rangle}{dp} = \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\psi^*(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \frac{dV(x)}{dx} \psi(x,t) dx$$
$$- \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) V(x) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} dx = \left\langle -\frac{dV}{dx} \right\rangle \tag{3.3.13}$$

**3.4** 考虑波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$描述的粒子,计算时间偏导数$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}$,这里 $\rho(\boldsymbol{r},t)$是概率密度,证明连续性方程$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = 0$ 是正确的,这里 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)$是概率流等于$\frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi\right)\right]$

**证明** 应用薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.4.1}$$

假设 $V(x)$是实函数,薛定谔方程的共轭方程是

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\psi^*(\boldsymbol{r},t)$$

根据 $\rho(\boldsymbol{r},t)$的定义,$\rho(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$,所以

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) + \psi^*(\boldsymbol{r},t) \frac{\partial \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \tag{3.4.2}$$

应用(3.4.1)及其共轭,我们得到

$$\frac{\partial \rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left[ \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi^*(\boldsymbol{r},t) \right] \psi(\boldsymbol{r},t) - \frac{1}{i\hbar} V(\boldsymbol{r},t)\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) -$$
$$\psi^*(\boldsymbol{r},t) \left[ \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi(\boldsymbol{r},t) \right] + \frac{1}{i\hbar} \psi^*(\boldsymbol{r},t) V(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$$
$$= -\frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\boldsymbol{r},t) \nabla^2 \psi(\boldsymbol{r},t) - \psi(\boldsymbol{r},t) \nabla^2 \psi^*(\boldsymbol{r},t)] \tag{3.4.3}$$

我们使

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[ \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \psi \right) \right] = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\boldsymbol{r},t) \nabla \psi(\boldsymbol{r},t) - \psi(\boldsymbol{r},t) \nabla \psi^*(\boldsymbol{r},t)] \tag{3.4.4}$$

利用定理$\nabla \cdot (U\boldsymbol{A}) = (\nabla U) \cdot \boldsymbol{A} + U(\nabla \cdot \boldsymbol{A})$,有

$$\nabla \cdot \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\hbar}{2mi} [(\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) + \psi^*(\nabla^2 \psi) - (\nabla \psi) \cdot (\nabla \psi^*) - \psi(\nabla^2 \psi^*)]$$
$$= \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^{2*}] \tag{3.4.5}$$

于是有

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{3.4.6}$$

**3.5** 考虑波函数

$$\psi(x,t)=\left[A\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/2m\hbar} \tag{3.5.1}$$

求出该波函数相应的概率流.

**解** 概率流定义为

$$j(x,t)=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right) \tag{3.5.2}$$

$\psi$ 的复共轭是 $\psi^*(x,t)=(A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}+B^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar})\mathrm{e}^{\mathrm{i}p^2t/2m\hbar}$；于是直接计算得到

$$\begin{aligned}j(x,t)=&\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\Big[(A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}+B^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar})\Big(\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}-\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\Big)\\&-\Big(-\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}+\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}B^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\Big)(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar})\Big]\\=&\frac{p}{2m}[(|A|^2-A^*B\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}px/\hbar}+AB^*\mathrm{e}^{2\mathrm{i}px/\hbar}-|B|^2)\\&-(-|A|^2-A^*B\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}px/\hbar}+AB^*\mathrm{e}^{2\mathrm{i}px/\hbar}+|B|^2)]\\=&\frac{p}{m}(|A|^2-|B|^2)\end{aligned} \tag{3.5.3}$$

注意,该波函数 $\psi(x,t)$ 表示沿相反方向运动的两股粒子流的叠加.每股粒子流在大小上是常量和时间无关的. $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2/2m\hbar}$ 一项意味着粒子的能量是 $p^2/2m$. 概率流的振幅是 $A$ 和 $B$.

**3.6** 证明对一维平方可积波包,有

$$\int_{-\infty}^{\infty}j(x)\mathrm{d}x=\frac{\langle p\rangle}{m} \tag{3.6.1}$$

这里 $j(x)$ 是概率流.

**证** 考虑积分 $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\mathrm{d}x$ ,该积分是有定义的,于是我们有 $\lim\limits_{x\to\pm\infty}|\psi(x,t)|^2=0$,所以

$$\int_{-\infty}^{\infty}j(x)\mathrm{d}x=\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}-\psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\right]\mathrm{d}x \tag{3.6.2}$$

分部积分给出

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x&=\lim_{\xi\to\infty}\left\{\left[\psi(x,t)\psi^*(x,t)\right]_{-\xi}^{\xi}-\int_{-\xi}^{\xi}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\psi^*(x,t)\mathrm{d}x\right\}\\&=-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{3.6.3}$$

因为我们有

$$\int_{-\infty}^{\infty}j(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\mathrm{d}x=\frac{\langle p\rangle}{m} \tag{3.6.4}$$

**3.7** 质量为 $m$ 的粒子约束在一维势 $V(x)$ 中,设在某些区域 $V(x)$ 是常数 $V(x)=V$. 在这些区域,求(a)$E>V$,(b)$E<V$ 和(c)$E=V$ 三种情况下粒子的定态波函数,这里 $E$ 是粒子的能量.

**解** (a) 定态波函数是方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2}+V\phi(x)=E\phi(x) \tag{3.7.1}$$

的解.对于 $E>V$,我们用定义 $\hbar^2k^2/2m=E-V$ 引入正的常数 $k$,于是有

$$\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2}+k^2\phi(x)=0 \tag{3.7.2}$$

该方程的解可以写成

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} \tag{3.7.3}$$

的形式,这里的 $A$ 是 $A'$ 是任意复常数.

(b) 我们用定义 $\hbar^2\rho^2/2m = V - E$ 引入正的常数 $\rho$,于是可以将(3.7.1)写为

$$\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} - \rho^2\phi(x) = 0 \tag{3.7.4}$$

(3.7.4)的一般解是 $\phi(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}$,这里 $B$ 和 $B'$ 是任意复常数.

(c) 当 $E = V$,我们有 $\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} = 0$;于是 $\phi(x)$ 是 $x$ 的线性函数 $\phi(x) = Cx + C'$,这里 $C$ 和 $C'$ 是复常数.

**3.8** 质量为 $m$ 的粒子被限制在宽为 $a$ 的一维无穷深势阱中:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} \leqslant x \leqslant \frac{a}{2} \\ \infty, & |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \tag{3.8.1}$$

求出哈密顿量的本征态(即定态波函数)和相应的本征能量.

**解答** 对 $x > a/2$ 和 $x < a/2$ 势为无穷大.所以在阱外不可能找到粒子,这意味着

$$\psi(x > a/2) = 0, \qquad \psi(x < a/2) = 0 \tag{3.8.2}$$

在区间 $-a/2 \leqslant x \leqslant a/2$ 势为常数,$V(x) = 0$ 因而我们可以用问题 3.7 的结果.我们区分开关于能量 $E$ 的三种可能性,如同在问题 3.7 中(a)一样,当 $E > 0$ 我们定义正常数 $k$,$\hbar^2k^2/2m = E$;于是我们有 $\phi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$,加上连续性条件,得到

$$\text{I}\ Ae^{ika/2} + A'e^{-ika/2} = 0, \quad \text{II}\ Ae^{-ika/2} + A'e^{ika/2} = 0 \tag{3.8.3}$$

(3.8.3 I)乘以 $e^{ika/2}$ 得到 $A' = -Ae^{ika}$,将 $A'$ 代入(3.8.3 II)得到

$$Ae^{-ika/2} - Ae^{ika}e^{ika/2} = 0 \tag{3.8.4}$$

(3.8.4)乘以 $e^{-ika/2}$ 并除以 $A[A \neq 0$,否则 $\psi(x) = 0]$,我们得到 $e^{-ika} - e^{ika} = 0$.使用关系式 $e^{i\alpha} = \cos\alpha + i\sin\alpha$,我们有 $-2i\sin(ka) = 0$ 最后的关系式仅当 $ka = n\pi$ 时成立,这里 $n$ 是整数.另外,因为 $k$ 必须是正数,$n$ 也必须是正数.我们看到粒子可能的正值能量是

$$E_n = \frac{\hbar^2k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2} \tag{3.8.5}$$

相应本征函数是

$$\psi_n(x) = Ae^{ik_nx} - Ae^{ik_na}e^{-ik_nx} = Ae^{in\pi x/a} - e^{in\pi(a-x)/a} = Ae^{in\pi/2}[e^{in\pi(x/a-1/2)} - e^{in\pi(x/a-1/2)}]$$

$$= C\sin\left[n\pi\left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)\right] \qquad (n = 1,2,\cdots) \tag{3.8.6}$$

其中 $C$ 是归一化常数,由积分式

$$\frac{1}{C^2} = \int_{-a/2}^{a/2}\sin^2\left[n\pi\left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)\right]dx \tag{3.8.7}$$

给出.设 $y = \frac{x}{a} - \frac{1}{2}$,则 $dy = \frac{dx}{a}$,(3.8.7)变为

$$\frac{1}{C^2} = a\int_{-1}^{0}\sin^2(n\pi y)dy = \frac{a}{2}\int_{-1}^{0}[1 - \cos(2\pi ny)]dy = \frac{a}{2}\left[y - \frac{\sin(2\pi ny)}{2\pi n}\right]_{-1}^{0} = \frac{a}{2} \tag{3.8.8}$$

所以,$C = \sqrt{2/a}$,最后

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[n\pi\left(\frac{x}{a} - \frac{1}{2}\right)\right] \tag{3.8.9}$$

现在,考虑 $E < 0$ 的情况,如同问题 3.7(b),我们引入正的常数 $\rho$,$\hbar^2\rho^2/2m = -E$.定态波函数应当是 $\psi(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}$.施加边界条件,我们得到

$$\text{I}\quad Be^{\rho a/2}+B'e^{-\rho a/2}=0,\quad \text{II}\quad Be^{-\rho a/2}+B'e^{\rho a/2}=0 \tag{3.8.10}$$

(3.8.10 Ⅰ)乘以 $e^{\rho a/2}$ 得到 $B'=-Be^{\rho a}$，于是 $Be^{-\rho a/2}-Be^{\rho a}e^{\rho a/2}=0$，乘以 $e^{\rho a/2}$ 并除以 $B$，我们得到 $1-e^{2\rho a}=0$，因而 $2\rho a=0$，因为 $\rho$ 必须是正数，不存在相应于负能量的态.

最后，我们考虑 $E=0$ 的情况. 根据题 3.7(c). 我们有态函数 $\psi(x)=Cx+C'$，施加边界条件得到

$$C\frac{a}{2}+C'=0,\qquad -C\frac{a}{2}+C'=0 \tag{3.8.11}$$

解此方程组，得到 $C=C'=0$，于是，结论是：不存在能量 $E=0$ 的态.

**3.9**　参看问题 3.8. 在 $t=0$，粒子处于两个基态波函数线性组合描述的态

$$\psi(x,0)=\alpha\psi_1(x)+\beta\psi_2(x)\qquad (|\alpha|^2+|\beta|^2=1) \tag{3.9.1}$$

(a) 求出含时波函数 $\psi(x,t)$ 并计算 $x$ 与 $p_x$ 作为时间函数的平均值.

(b) 验证 Ehrenfest 定理 $m\dfrac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}=\langle p_x\rangle$

**解答**　(a) 考虑问题 3.1 的(c)，定态含时波函数形为

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)\exp(-\mathrm{i}E_nt/\hbar) \tag{3.9.2}$$

随后，应用叠加原理给出

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\alpha\psi_1(x,t)+\beta\psi_2(x,t)\\&=\alpha\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\exp\left(\frac{-\pi^2\mathrm{i}\hbar t}{2ma^2}\right)\right]+\beta\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\exp\left(\frac{-\pi^2\mathrm{i}\hbar t}{2ma^2}\right)\right]\end{aligned} \tag{3.9.3}$$

计算积分

$$\begin{aligned}\langle x\rangle&=\int_{-a/2}^{a/2}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)\mathrm{d}x=\int_{-a/2}^{a/2}[\alpha^*x\psi_1^*(x,t)+\beta^*\psi_2^*(x,t)]x[\alpha\psi_1(x,t)+\beta\psi_2(x,t)]\mathrm{d}x\\&=\alpha^2\int_{-a/2}^{a/2}x|\psi_1(x,t)|^2\mathrm{d}x+\beta^2\int_{-a/2}^{a/2}x|\psi_2(x,t)|^2\mathrm{d}x+2\mathrm{Re}\left[\alpha^*\beta\int_{-a/2}^{a/2}x\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t)\mathrm{d}x\right]\end{aligned} \tag{3.9.4}$$

分别计算每一个积分

$$I_1\equiv\int_{-a/2}^{a/2}x|\psi_1(x,t)|^2\mathrm{d}x=\frac{a}{2}\int_{-a/2}^{a/2}x\sin\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\mathrm{d}x \tag{3.9.5}$$

设 $y=\dfrac{x}{a}-\dfrac{1}{2}$，则 $\mathrm{d}y=\dfrac{\mathrm{d}x}{a}$，代入上式，于是有

$$I_1=a\int_{-1}^{0}(2y+1)\sin^2(\pi y)\mathrm{d}y=2a\int_{-1}^{0}y\sin^2(\pi y)\mathrm{d}y+a\int_{-1}^{0}\sin^2(\pi y)\mathrm{d}y \tag{3.9.6}$$

积分结果给出

$$I_1=2a\left[\frac{y^2}{4}-\frac{y\sin(2\pi y)}{4\pi}-\frac{\cos(2\pi y)}{8\pi^2}\right]_{-1}^{0}+a\left[\frac{y}{2}-\frac{\sin(2\pi y)}{4\pi}\right]_{-1}^{0}=-\frac{a}{2}+\frac{a}{2}=0 \tag{3.9.7}$$

重复上述步骤，可以证明

$$I_2\equiv\int_{-a/2}^{a/2}x|\psi_2(x,t)|^2\mathrm{d}x=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2}x\sin^2\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\mathrm{d}x=0 \tag{3.9.8}$$

注意，这个结果也可以用不同的方法得到，函数 $f(x)=\sin^2\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]$ 是 $x$ 的偶函数

$$\begin{aligned}f(-x)&=\left[\sin2\pi\left(-\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]^2=\left[-\sin2\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)\right]^2=\left[-\sin\left(2\pi\left(\frac{x}{a}+\frac{1}{2}\right)+2\pi\right)\right]^2\\&=\left[\sin2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]^2=f(x)\end{aligned} \tag{3.9.9}$$

另一方面，$f(x)=x$ 是 $x$ 的奇函数，因而 $x\sin^2\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]$ 是 $x$ 的奇函数，它从 $-a/2$ 到 $a/2$ 积分为零. 现在考虑(3.9.4)的最后一项

$$I_3 \equiv \int_{-a/2}^{a/2} x\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t)\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} x\sin\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\sin\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\exp\left(-\frac{3\pi^2\mathrm{i}\hbar t}{2ma^2}\right)\mathrm{d}x \tag{3.9.10}$$

令 $y=\frac{x}{a}-\frac{1}{2}$，有 $\mathrm{d}y=\mathrm{d}x/a$. 再令 $\omega=3\pi^2\hbar/2ma^2$，我们得到

$$I_3 = a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\int_{-1}^{0}(2y+1)\sin(\pi y)\sin(2\pi y)\mathrm{d}y = a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\int_{-1}^{0}(2y+1)\frac{1}{2}[\cos(\pi y)-\cos(3\pi y)]\mathrm{d}y \tag{3.9.11}$$

$$=\frac{16a}{9\pi^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

最后，回到(3.9.4)，我们得到

$$\langle x\rangle = \frac{16a}{9\pi^2}2\mathrm{Re}(\alpha^*\beta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}) = \frac{32a}{9\pi^2}[\mathrm{Re}(\alpha^*\beta)\cos(\omega t)+\mathrm{Re}(\mathrm{i}\alpha^*\beta)\sin(\omega t)] \tag{3.9.12}$$

考虑动量平均值

$$\langle p_x\rangle = \int_{-a/2}^{a/2}\psi^*\ \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int_{-a/2}^{a/2}[\alpha^*\psi_1^*(x,t)+\beta^*\psi_2^*(x,t)]\left[\alpha\frac{\partial\psi_1(x,t)}{\partial x}+\beta\frac{\partial\psi_2(x,t)}{\partial x}\right]\mathrm{d}x \tag{3.9.13}$$

分别计算(3.9.13)四项的每一项

$$\int_{-a/2}^{a/2}\psi_1^*\ \frac{\partial\psi_1(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\ \frac{\pi}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\sin\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\cos\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\mathrm{d}x \tag{3.9.14}$$

$\sin\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]$ 是 $x$ 的偶函数，$\cos\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]$ 是奇函数，于是它们的乘积是奇函数，因而两者的积在区间 $x=-a/2$ 和 $x=a/2$ 的积分为零，还有

$$\int_{-a/2}^{a/2}\psi_2^*(x,t)\frac{\partial\psi_2(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\ \frac{2\pi}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\sin\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\cos\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\mathrm{d}x \tag{3.9.15}$$

$\sin\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]$ 是 $x$ 的奇函数，$\cos\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]$ 是奇函数，它们的乘积是奇函数，因面，在区间 $x=-a/2$ 和 $x=a/2$ 的积分为零，我们有

$$I\equiv\int_{-a/2}^{a/2}\psi_1^*(x,t)\frac{\partial\psi_2(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x = \frac{4\pi}{a^2}\int_{-a/2}^{a/2}\sin\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\cos\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}x \tag{3.9.16}$$

定义 $y=\frac{x}{a}-\frac{1}{2}$，有 $\mathrm{d}y=\frac{\mathrm{d}x}{a}$，积分 $I$ 变为

$$I = \frac{4\pi}{a^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\int_{-1}^{0}\sin(\pi y)\cos(2\pi y)\mathrm{d}y = \frac{4\pi}{a}\left[\frac{\cos(\pi y)}{2\pi}-\frac{\cos(3\pi y)}{6\pi}\right]_{-1}^{0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \frac{8}{3a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{3.9.17}$$

最后

$$I'\equiv\int_{-a/2}^{a/2}\psi_2^*(x,t)\frac{\partial\psi_1(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x = \frac{2\pi}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\sin\left[2\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\cos\left[\pi\left(\frac{x}{a}-\frac{1}{2}\right)\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}x \tag{3.9.18}$$

使用上面同样的定义，我们得到

$$I' = \frac{2\pi}{a}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\int_{-1}^{0}\sin(2\pi y)\cos(\pi y)\mathrm{d}y = \frac{2\pi}{a}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\left[-\frac{\cos(\pi y)}{2\pi}-\frac{\cos(3\pi y)}{6\pi}\right]_{-1}^{0} = -\frac{8}{3a}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{3.9.19}$$

将该结果代入(3.9.13)，最后得到

$$\langle p_x \rangle = \frac{8\hbar}{3\mathrm{i}a}[\alpha^* \beta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \alpha\beta^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}] \tag{3.9.20}$$

(b) 在(a)中,我们得到

$$\langle x(t) \rangle = \frac{16a}{9\pi^2}\left[\alpha^* \exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\pi^2\hbar}{2ma^2}t\right) + \alpha\beta^* \exp\left(\frac{3\mathrm{i}\pi^2\hbar}{2ma^2}t\right)\right] \tag{3.9.21}$$

因而,我们有

$$m\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t} = m\frac{16a}{9\pi^2}\frac{3\mathrm{i}\pi^2\hbar}{2ma^2}\left[-\alpha^* \beta\exp\left(-\frac{3\pi^2\mathrm{i}\hbar}{2ma^2}t\right) + \alpha\beta^* \exp\left(\frac{3\pi^2\mathrm{i}\hbar}{2ma^2}t\right)\right] = \frac{8\hbar}{3\mathrm{i}a}[\alpha^* \beta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \alpha\beta^* \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}] \tag{3.9.22}$$

仔细辨认,最后一个表达式和$\langle p_x \rangle$的结果完全相同.所以,对这种特殊情况 Ehrenfest 定理是成立的.

**3.10** 参看问题 3.8,现在假设势阱位于区间 $x=0$ 和 $x=a$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant a \\ \infty, & \text{其它} \end{cases} \tag{3.10.1}$$

求本征态和相应的本征能量.

**解答** 我们将势阱平移,$\tilde{x} = x - a/2$,于是,就变得与问题 3.8 完全相同

$$V(\tilde{x}) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} \leqslant \tilde{x} \leqslant \frac{a}{2} \\ \infty, & \text{其他} \end{cases} \tag{3.10.2}$$

应用问题 3.8 的解,可能的能量是

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2} \tag{3.10.3}$$

这里 $n$ 是正整数,相应的本征态是

$$\psi_n(\tilde{x}) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin n\pi\left(\frac{\tilde{x}}{a} - \frac{1}{2}\right) \tag{3.10.4}$$

或者,使用原来的坐标,我们有

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a} - n\pi\right) \tag{3.10.5}$$

**3.11** 考虑阶跃势(图 3-3)

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \tag{3.11.1}$$

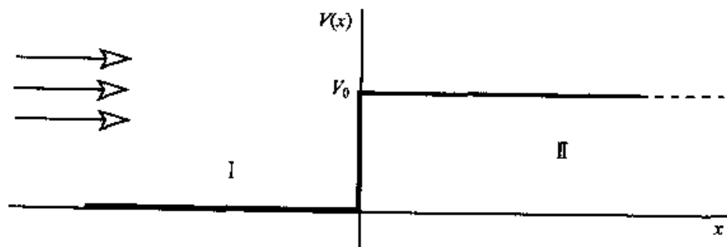



图 3-3

能量 $E > V_0$ 的粒子流从 $x = -\infty$向右运动.(a)写出每个区域的定态解;(b)表述这样的事实,即没有反向粒子流从 $x = \infty$向左运动;(c)应用衔接条件,用入射波振幅表示反射和

透射波振幅. 注意势是有界的. 可以证明波函数的导数对所有的 $x$ 连续.

**解答** (a) 参考问题 3.7 的(a), 我们定义

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} \tag{3.11.2}$$

区域 I($x<0$)和区域 II($x>0$)的一般解是

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}, \qquad \phi_{\mathrm{II}}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \tag{3.11.3}$$

(b) 形为 $e^{ikx}$ 的波函数代表从 $x=-\infty$ 向右运动的粒子, 而 $e^{-ikx}$ 代表从 $x=\infty$ 向左运动的粒子. $\phi_{\mathrm{I}}(x)$ 是两个波的迭加, 第一项是从左向右运动的入射粒子的波函数, 其振幅为 $A_1$; 第二项的振幅为 $A'$, 代表从右向左运动的反射粒子. 因为, 我们认为粒子从 $x=-\infty$ 向右运动, 在区域 II 不可能找到从 $x=\infty$ 向左运动的粒子流. 因而我们令 $A'_2=0$, 这样 $\phi_{\mathrm{II}}(x)$ 代表透射粒子流, 其振幅为 $A_2$.

(c) 首先, 我们使用 $\phi(x)$ 在 $x=0$ 连续的条件, $\phi_{\mathrm{I}}(0)=\phi_{\mathrm{II}}(0)$. 代入 3.11.3 给出

$$A_1 + A'_1 = A_2 \tag{3.11.4}$$

第二步, $\frac{\partial\phi(x)}{\partial x}$ 在 $x=0$ 点也应当连续; 我们有

$$\frac{\partial\phi_{\mathrm{I}}(x)}{\partial x} = ik_1 A_1 e^{ik_1 x} - ik_1 A'_1 e^{ik_1 x}, \qquad \frac{\partial\phi_{\mathrm{II}}(x)}{\partial x} = ik_2 A_2 e^{ik_2 x} \tag{3.11.5}$$

使用 $\frac{\partial\phi_{\mathrm{I}}(0)}{\partial x} = \frac{\partial\phi_{\mathrm{II}}(0)}{\partial x}$, 我们有

$$ik_1(A_1 - A'_1) = ik_2 A_2 \tag{3.11.6}$$

代入 $A_2$, 给出 $A_1 + A'_1 = (A_1 - A'_1)k_1/k_2$,

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \tag{3.11.7}$$

最后, 将(3.11.7)代入(3.11.4)得到 $A_1\left(1+\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)=A_2$, 因而

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \tag{3.11.8}$$

**3.12** 参考问题 3.11, (a)计算区域 I 和区域 II 中的概率流, 并解释每一项. (b)求出反射和透射系数.

**解答** (a) 对于定态 $\phi(x)$, 概率流是时间无关的并等于

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\varphi^*(x)\frac{\partial\phi(x)}{\partial x} - \phi(x)\frac{\partial\phi^*(x)}{\partial x}\right] \tag{3.12.1}$$

对区域 I, 应用(3.11.3), 我们有

$$\begin{aligned} J_{\mathrm{I}}(x) &= \frac{\hbar}{2mi}[(A_1^* e^{-ik_1 x} + A_1'^* e^{ik_1 x})(ik_1 A_1 e^{ik_1 x} - ik_1 A'_1 e^{-ik_1 x}) \\ &\quad - (A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x})(-ik_1 A_1^* e^{-ik_1 x} + ik_1 A_1'^* e^{ik_1 x})] = \frac{\hbar k_1}{m}(|A_1|^2 - |A'_1|^2) \end{aligned} \tag{3.12.2}$$

同样, 对于区域 II, 我们有

$$J_{\mathrm{II}}(x) = \frac{\hbar}{2mi}[A_2^* e^{-ik_2 x}(ik_2)e^{ik_1 x} - A_2 e^{k_2 x}(-ik_2)e^{-ik_2 x}] = \frac{\hbar k_2}{m}|A_2|^2 \tag{3.12.3}$$

在区域 I, 概率流是两项之和, $\hbar k_1|A_1|^2/m$ 相应于从左向右的入射粒子流, 而 $-\hbar k_1|A'_1|^2/m$ 相应于反射粒子流(从右向左运动). 注意, 在区域 II, 概率流代表透射波.

(b) 应用反射系数的定义(见理论摘要, 参考方程 3.27), 它等于

$$R=\frac{|A'_1|^2\hbar k_1/m}{|A_1|^2\hbar k_1/m}=\left|\frac{A'_1}{A_1}\right|^2 \tag{3.12.4}$$

代入(3.11.7),我们得到

$$R=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}=1-\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \tag{3.12.5}$$

透射系数是

$$T=\frac{|A_2|^2\hbar k_2/m}{|A_2|^2\hbar k_1/m}=\frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 \tag{3.12.6}$$

代入(3.11.8),得到

$$T=\frac{k_2}{k_1}\left(\frac{2k_1}{k_1+k_2}\right)^2=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \tag{3.12.7}$$

**3.13**　考虑质量为 $m$ 的自由粒子,其波函数在 $t=0$ 时为

$$\psi(x,0)=\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-a^2(k-k_0)^2/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{3.13.1}$$

计算含时波包 $\psi(x,t)$和概率密度$|\psi(x,t)|^2$.定性地描述 $t<0,t=0$ 和 $t>0$ 时的概率密度.你可以使用如下的恒等式:对于任何复数 $\alpha$ 和$\beta$,如果$-\pi/4<\arg(\alpha)<\pi/4$ 则

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2(y+\beta)^2}\mathrm{d}y=\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \tag{3.13.2}$$

**解答**　$t=0$ 时的波包是系数为$\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\mathrm{e}^{-a^2(k-k_0)^2/4}$的平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 的叠加;这是中心位于 $k=k_0$ 的高斯曲线.平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 的时间演化具有形式 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(k)t/\hbar}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hbar k^2t/2m}$.我们令 $\omega(k)=\hbar k^2/2m$,于是应用迭加原理,波包 $\psi(x,0)$的含时式为

$$\psi(x,t)=\frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-a^2(k-k_0)^2/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kx-\omega(k)t]}\mathrm{d}k \tag{3.13.3}$$

我们的目的是将积分化成(3.13.2)的形式,因而,重新整理指数项

$$\begin{aligned}-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2+\mathrm{i}[kx-\omega(k)t]&=-\left(\frac{a^2}{4}+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)k^2+\left(\frac{a^2}{2}k_0+\mathrm{i}x\right)k-\frac{a^2}{4}k_0^2\\&=-\left(\frac{a^2}{4}+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)\left[k-\frac{\frac{a^2}{2}k_0+\mathrm{i}x}{2\left(\frac{a^2}{4}+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)}\right]^2+\frac{\left(\frac{a^2}{2}k_0+\mathrm{i}x\right)^2}{4\left(\frac{a^2}{4}+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)}-\frac{a^2}{4}k_0^2\end{aligned} \tag{3.13.4}$$

代入(3.13.4)并使用(3.13.2)得到

$$\psi(x,t)=\frac{\sqrt{a}}{2^{3/4}\pi^{1/4}}\frac{\exp\left(-\frac{a^2k_0^2}{4}\right)}{\sqrt{\frac{a^2}{4}+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}}}\exp\left[\frac{\left(\frac{a^2}{2}k_0+\mathrm{i}x\right)^2}{a^2+\frac{2\mathrm{i}\hbar t}{m}}\right] \tag{3.13.5}$$

(3.13.5)的共轭复数是

$$\psi^*(x,t)=\frac{\sqrt{a}}{2^{3/4}\pi^{1/4}}\frac{\exp\left(-\frac{a^2k_0^2}{4}\right)}{\sqrt{\frac{a^2}{4}-\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}}}\exp\left[\frac{\left(\frac{a^2}{2}k_0-\mathrm{i}x\right)^2}{a^2-\frac{2\mathrm{i}\hbar t}{m}}\right] \tag{3.13.6}$$

所以

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{a}{2^{3/2}\sqrt{\pi}}\frac{\exp\left(-\frac{a^2k_0^2}{2}\right)}{\sqrt{\left(\frac{a^2}{4}+\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)\left(\frac{a^2}{4}-\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)}}\exp\left[\frac{\left(\frac{a^2k_0}{2}\right)^2-x^2+\mathrm{i}a^2k_0x}{a^2+2\mathrm{i}\hbar t/m}+\frac{\left(\frac{a^2k_0}{2}\right)^2-x^2-\mathrm{i}a^2k_0x}{a^2-2\mathrm{i}\hbar t/m}\right]$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\frac{1}{\sqrt{1+4\hbar^2t^2/m^2a^4}}\exp\left[-\frac{\frac{a^2k_0^2}{2}\left(a^4+\frac{4\hbar^2t^2}{m^2}\right)+2a^2\left(\frac{a^4k_0^2}{2}-x^2\right)+\frac{4\hbar k_0a^2}{m}xt}{a^4+4\hbar^2t^2/m^2}\right]$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\frac{1}{\sqrt{1+4\hbar^2t^2/m^2a^4}}\exp\left[-\frac{2a^2(x-\hbar k_0t/m)^2}{a^4+4\hbar^2t^2/m^2}\right] \tag{3.13.7}$$

在任何时刻 $t$,概率密度都是中心在 $x_C=(\hbar k_0/m)t$ 的高斯曲线,(即波包以速度 $V_0=\hbar k_0/m$ 运动).$|\psi(x,t)|^2$ 的值在 $t=0$ 最大,随 $t\to\infty$ 趋于零.波包的宽度在 $t=0$ 最小,当 $t\to\infty$ 时趋于∞,参看图 3-4.

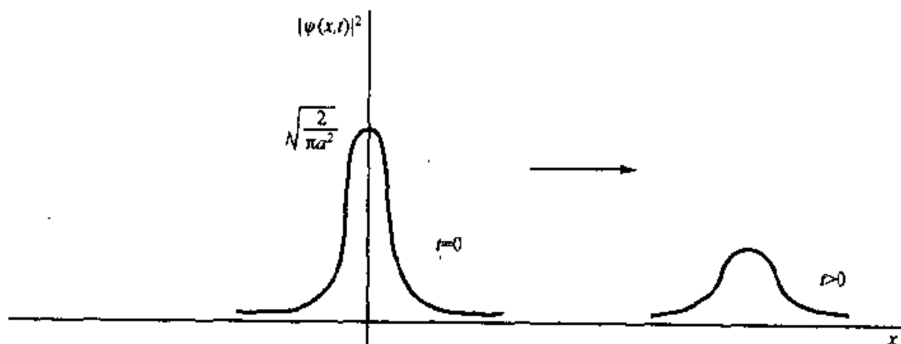



图 3-4

**3.14** 考虑矩形势垒(图 3-5)

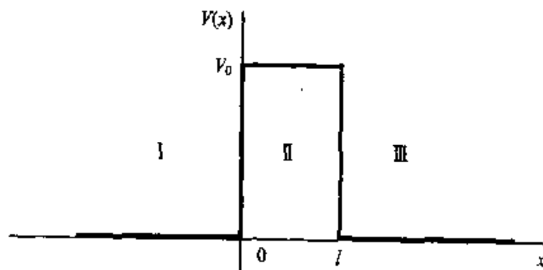



图 3-5

$$V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0, & 0<x<l\\ 0, & l<x\end{cases} \tag{3.14.1}$$

(a) 设入射粒子能量 $E>V_0$,从 $x=-\infty$ 入射,求定态波函数,利用在 $x=0$ 和 $x=l$ 的衔接条件.(b)求透射和反射系数.简述透射系数是垒宽 $l$ 的函数,并讨论所得结果.

**解答**: (a) 类似问题 3.7 的(a),我们定义

$$k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k_2=\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} \tag{3.14.2}$$

因而,三个区域Ⅰ($x<0$),Ⅱ($0<x<l$)和Ⅲ($x>l$)的定态波函数是

$$\begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \end{cases} \tag{3.14.3}$$

每一个解都是代表从左向右和从右向左运动粒子的波函数之和.我们考虑粒子从 $x=-\infty$ 入射,因而在区域Ⅲ没有从 $x=\infty$ 向左运动的粒子.所以我们令 $A'_3=0$.在 $x=l$ 的衔接条件使我们能用 $A_3$ 表示 $A_2$ 和 $A'_2$.$\phi(x)$在 $x=l$ 的连续性导出 $\phi_{\mathrm{II}}(l)=\phi_{\mathrm{III}}(l)$,于是

$$A_2 e^{ik_2 l} + A'_2 e^{-ik_2 l} = A_3 e^{ik_1 l} \tag{3.14.4}$$

$\phi'(x)$的连续性导出

$$ik_2 A_2 e^{ik_2 l} - ik_2 A'_2 e^{-ik_2 l} = ik_1 A_3 e^{ik_1 l} \tag{3.14.5}$$

方程(3.14.4)和(3.14.5)给出

$$\begin{cases} A_2 = \left[\dfrac{k_2+k_1}{2k_2} e^{i(k_1-k_2)l}\right] A_3 \\ A'_2 = \left[\dfrac{k_2-k_1}{2k_2} e^{i(k_1+k_2)l}\right] A_3 \end{cases} \tag{3.14.6}$$

在 $x=0$ 的衔接条件给出

$$\phi_{\mathrm{I}}(0) = \phi_{\mathrm{II}}(0) \Rightarrow A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2 \tag{3.14.7}$$

和

$$\phi'_{\mathrm{I}}(0) = \phi'_{\mathrm{II}}(0) \Rightarrow ik_1 A_1 - ik_1 A'_1 = ik_2 A_2 - ik_2 A'_2 \tag{3.14.8}$$

于是,我们得到

$$A_1 = \frac{k_1+k_2}{2k_1} A_2 + \frac{k_1-k_2}{2k_1} A'_2 \tag{3.14.9}$$

应用方程(3.14.6),我们用 $A_3$ 表示 $A_1$

$$\begin{aligned} A_1 &= \left[\frac{(k_1+k_2)^2}{4k_1k_2} e^{i(k_1-k_2)l} - \frac{(k_1-k_2)^2}{4k_1k_3} e^{i(k_1+k_2)l}\right] A_3 \\ &= \left[\frac{(k_1+k_2)^2-(k_1-k_2)^2}{4k_1k_2}\cos(k_2 l) - i\frac{(k_1+k_2)^2+(k_1-k_2)^2}{4k_1k_2}\sin(k_2 l)\right] e^{ik_1 l} A_3 \\ &= \left[\cos(k_2 l) - i\frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_2 l)\right] e^{ik_1 l} A_3 \end{aligned} \tag{3.14.10}$$

同样,我们用 $A_3$ 表示 $A'_1$

$$\begin{aligned} A'_1 &= \frac{k_1-k_2}{2k} A_2 + \frac{k_1+k_2}{2k} A'_2 = \left[\frac{(k_1+k_2)(k_1-k_2)}{4k_1 k} e^{i(k_1-k_2)l} + \frac{(k_1+k_2)(k_2-k_1)}{4k_2} e^{i(k_1-k_2)l}\right] A_3 \\ &= \left[\frac{(k_1^2-k_2^2)+(k_2^2-k_1^2)}{4k_1k_2}\cos(k_2 l) + i\frac{(k_2^2-k_1^2)-(k_1^2-k_2^2)}{4k_1k_2}\sin(k_2 l)\right] A_3 = i\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin(k_2 l) e^{ik_1 l} A_3 \end{aligned} \tag{3.14.11}$$

(b) 反射系数是相应的,反射波和入射波振幅平方之比(和问题 3.12 比较)

$$R = \left|\frac{A'_1}{A_1}\right|^2 \tag{3.14.12}$$

利用(a)的结果,我们得到

$$R = \frac{\left[\dfrac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin(k_2 l)\right]^2}{\cos^2(k_2 l) + \left[\dfrac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_2 l)\right]^2} = \frac{(k_2^2-k_1^2)^2\sin^2(k_2 l)}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2-k_2^2)^2\sin^2(k_2 l)} \tag{3.14.13}$$

最后,透射系数为

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{1}{\cos^2(k_2 l) + \left(\dfrac{k_1^2-k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2\sin^2(k_2 l)} = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2-k_2^2)^2\sin^2(k_2 l)} \tag{3.14.14}$$

透射系数作为 $l$ 的函数在其最大值 1 和最小值$\frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2+(k_1^2-k_2^2)^2}$之间振荡(见图 3-6). 当 $l$ 为 $\pi/k_2$ 的整数倍,在势垒上没有反射,这种情况称为共振散射(参看第十五章).

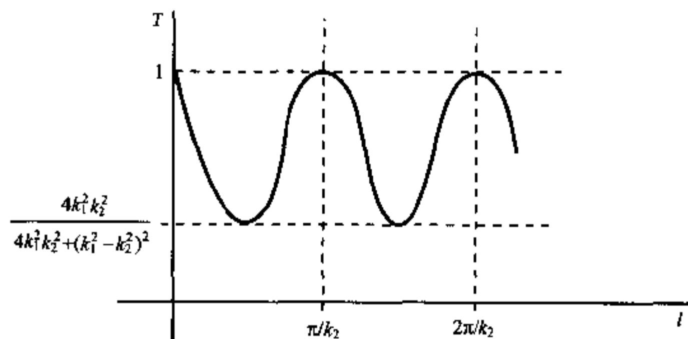



图 3-6

**3.15** 考虑问题 3.14 中的矩形势垒. 求描述能量 $E<V_0$ 的入射粒子的定态波函数.

**解** 求解方法和 3.14 相似. 参考问题 3.7,我们定义

$$k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad \rho=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \tag{3.15.1}$$

区域Ⅰ$(x<0)$,Ⅱ$(0<x<l)$和Ⅲ$(x>l)$的定态解是

$$\begin{cases}\phi_{\mathrm{I}}(x)=A_1e^{ik_1x}+A'_1e^{-ik_1x}\\ \phi_{\mathrm{II}}(x)=A_2e^{\rho x}+A'_2e^{-\rho x}\\ \phi_{\mathrm{III}}(x)=A_3e^{ik_1x}+A'_3e^{-ik_1x}\end{cases} \tag{3.15.2}$$

我们描述从 $x=-\infty$来的入射粒子,于是,我们令 $A'_2=0$,利用 $x=l$ 的衔接条件,给出

$$\phi_{\mathrm{II}}(l)=\phi_{\mathrm{III}}(l)\Rightarrow A_2e^{\rho l}+A'_2e^{-\rho l}=A_3e^{ik_1x} \tag{3.15.3}$$

$$\phi'_{\mathrm{II}}(l)=\phi'_{\mathrm{III}}(l)\Rightarrow A_2\rho e^{\rho l}-A'_2e^{-\rho l}=ik_1A_3e^{ik_1l} \tag{3.15.4}$$

从(3.15.3)和(3.15.4)我们得到

$$A_2=\left[\frac{\rho+ik_1}{2\rho}e^{(ik_1-\rho)l}\right]A_3,A'_2=\left[\frac{\rho-ik_1}{2\rho}e^{(ik_1+\rho)l}\right]A_3 \tag{3.15.5}$$

在 $x=0$ 的衔接条件给出

$$\phi_{\mathrm{I}}(0)=\phi_{\mathrm{II}}(0)\Rightarrow A_1+A'_1=A_2+A'_2 \tag{3.15.6}$$

$$\phi'_{\mathrm{I}}(0)=\phi'_{\mathrm{II}}(0)\Rightarrow ik_1A_1-ik_1A'_1=\rho A_2-\rho A'_2 \tag{3.15.7}$$

从(3.15.6)和(3.15.7)我们得到

$$A_1=\frac{ik_1+\rho}{2ik_1}A_2+\frac{ik_1-\rho}{2ik_1}A'_2 \tag{3.15.8}$$

使用(3.15.5),我们得到

$$A_1=\left[\frac{(ik_1+\rho)^2}{4ik_1\rho}e^{(ik_1-\rho)l}-\frac{(ik_1-\rho)^2}{4ik_1\rho}e^{(ik_1+\rho)l}\right]A_3=\left[-i\frac{k_1^2-\rho^2}{2k_1\rho}\sinh(\rho l)+\cosh(\rho l)\right]e^{ik_1l}A_3 \tag{3.15.9}$$

最后,考虑透射系数

$$T=\left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2=\frac{1}{\cosh^2(\rho l)+\left(\frac{k_1^2-\rho^2}{2k_1\rho}\right)^2\sinh^2(\rho l)}=\frac{1}{1+\left(\frac{k_1^2+\rho^2}{2k_1\rho}\right)^2\sinh^2(\rho l)} \tag{3.15.10}$$

在这里，我们使用了恒等式 $\cosh^2\alpha - \sinh^2\alpha = 1$，所以有

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh\left[\frac{\sqrt{2m|V_0 - E|}}{\hbar}\right]^2} \tag{3.15.11}$$

我们看到和经典理论所预言的相反结果．能量为 $E < V_0$ 的粒子穿越势垒的概率不为零．这一现象称为隧道效应．

**3.16** 在本问题中我们研究有限矩形势阱的束缚态(参看图 3-7)．考虑有限势阱，其定义为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x < -a/2) \\ -V_0, & (-a/2 < x < a/2) \\ 0, & (a/2 < x) \end{cases} \tag{3.16.1}$$

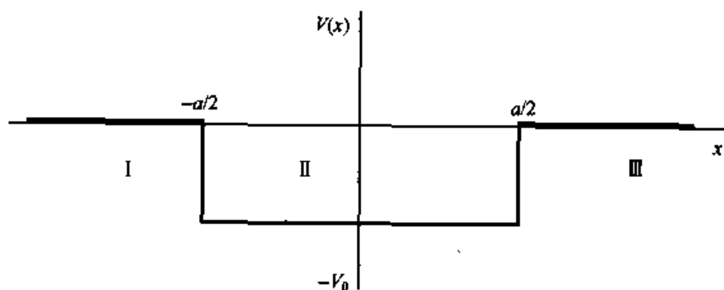



图 3-7

(a) 对每个区域 I $(x < -a/2)$，II $(-a/2 < x < a/2)$，和 III $(a/2 < x)$ 写出质量为 $m$ 能量 $-V_0 < E < 0$ 的粒子的定态解．(b)利用在 $x = -a/2$ 和 $x = a/2$ 的衔接条件，求出可能的能量应满足的方程，画出方程的示意图以讨论解的定性性质．

**解答**　(a) 参考问题 3.7，我们定义

$$\rho = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}, \qquad k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \tag{3.16.2}$$

各个区域的定态解是

$$\begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\rho x} + A'e^{-\rho x} \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = Be^{ikx} + B'e^{-ikx} \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = C'e^{\rho x} + Ce^{-\rho x} \end{cases} \tag{3.16.3}$$

因为区域 I 和区域 III $\phi(x)$必须是有界的，我们令 $A' = C' = 0$；因而

$$\begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\rho x} \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = Be^{ikx} + B'e^{-ikx} \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{-\rho x} \end{cases} \tag{3.16.4}$$

(b) $\phi(x)$和 $\phi'(x)$在 $x = -a/2$ 连续给出

$$\begin{cases} Ae^{-\rho a/2} = Be^{-ika/2} + B'e^{ika/2} \\ \rho Ae^{-\rho a/2} = ikBe^{-ika/2} - ikB'e^{ika/2} \end{cases} \tag{3.16.5}$$

同样在 $x = a/2$ 的衔接条件给出

$$\begin{cases} Ce^{-\rho a/2} = Be^{ika/2} + B'e^{-ika/2} \\ -\rho Ce^{-\rho a/2} = ikBe^{ika/2} - ikB'e^{-ika/2} \end{cases} \tag{3.16.6}$$

所以，我们可以用 $A$ 表示 $B$ 和 $B'$

$$B=\left(\frac{\rho+\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{(-\rho-\mathrm{i}k)a/2}\right)A,\ B'=\left(-\frac{\rho-\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{(-\rho+\mathrm{i}k)a/2}\right)A \tag{3.16.7}$$

将(3.16.7)代入(3.16.6)得到

$$\begin{cases} C=\left(\dfrac{\rho+\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\dfrac{\rho-\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right)A \\ -\dfrac{\rho}{\mathrm{i}k}C=\left(\dfrac{\rho+\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\dfrac{\rho-\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right)A \end{cases} \tag{3.16.8}$$

将得到(3.16.8)的非零解，我们必须有

$$-\frac{\rho}{\mathrm{i}k}\left(\frac{\rho+\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\frac{\rho-\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right)=\left(\frac{\rho+\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+\frac{\rho-\mathrm{i}k}{2\mathrm{i}k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right) \tag{3.16.9}$$

该式等价于

$$\left(\frac{\rho-\mathrm{i}k}{\rho+\mathrm{i}k}\right)^2=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka} \tag{3.16.10}$$

方程(3.16.10)是关于能量的方程，因 $\rho$ 和 $k$ 依赖能量和有关的常数方程(3.16.10)以 $E$ 表出的解就是阱中的束缚态所对应的能量.

我们变换方程(3.16.10)，使其变成仅用 $k$ 表示的方程.这里有两种可能的情况.第一种是

$$\mathrm{I}\qquad \left(\frac{\rho-\mathrm{i}k}{\rho+\mathrm{i}k}\right)^2=-\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{3.16.11}$$

方程(3.16.11)的左边是模为 1 相角为 $-2\arctan(k/\rho)$ 的复数.($\rho+\mathrm{i}k$ 是 $\rho-\mathrm{i}k$ 的复共轭).(3.16.11)的右边也是模为 1 的复数，而相角是 $\pi tka$ $(-\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi+ka)}$.因而，我们有

$$\arctan\left(\frac{k}{\rho}\right)=-\left(\frac{\pi}{2}+\frac{ka}{2}\right)\Rightarrow\frac{k}{\rho}=\tan\left[-\left(\frac{\pi}{2}+\frac{ka}{2}\right)\right]=-\tan\left(\frac{\pi}{2}+\frac{ka}{2}\right)=\cot\left(\frac{ka}{2}\right)=\frac{1}{\tan(ka/2)} \tag{3.16.12}$$

和

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right)=\frac{\rho}{k} \tag{3.16.13}$$

我们定义 $k_0=\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}=\sqrt{k^2+\rho^2}$，这里 $k_0$ 和 $E$ 无关，考虑到

$$\frac{1}{\cos^2(ka/2)}=1+\tan^2\left(\frac{ka}{2}\right)=\frac{k^2+\rho^2}{k^2}=\left(\frac{k_0}{k}\right)^2 \tag{3.16.14}$$

于是方程(3.16.11)等价于如下的方程组：

$$\begin{cases} \left|\cos\left(\dfrac{ka}{2}\right)\right|=\dfrac{k}{k_0} \\ \tan\left(\dfrac{ka}{2}\right)>0 \end{cases} \tag{3.16.15}$$

这里，我们使用(3.16.13)和(3.16.14)时，$\rho$ 和 $k$ 均为正数.

我们转向第二种情况，即

$$\mathrm{II}\qquad \left(\frac{\rho-\mathrm{i}k}{\rho+\mathrm{i}k}\right)^2=\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{3.16.16}$$

类似第一种情况的讨论，我们有

$$-2\arctan\left(\frac{k}{\rho}\right)=ka\Rightarrow\tan\frac{ka}{2}=-\frac{k}{\rho} \tag{3.16.17}$$

考虑到

$$\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)=\frac{\tan^2(ka/2)}{1+\tan^2(ka/2)}=\frac{k^2}{k^2+\rho^2} \tag{3.16.18}$$

于是

$$\begin{cases}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0\end{cases} \tag{3.16.19}$$

在图 3-8 中，我们给出(3.16.15)和(3.16.19)的示意图. 直线代表 $k/k$. 正弦曲线代表函数 $\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$ 和 $\left|\cos\frac{ka}{2}\right|$. 虚线部分是关于 $\tan\left(\frac{ka}{2}\right)$ 的条件无法实现的区域.

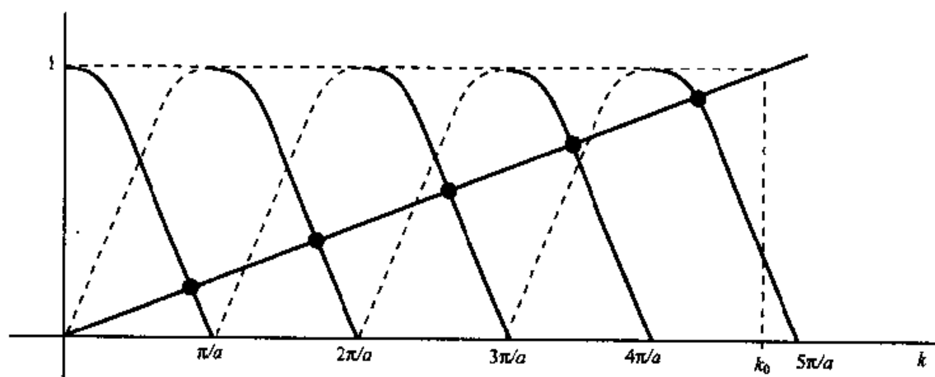



图 3-8

图形的交点代表用 $k$ 表示的解. 从这些解可以确定容许的能量. 从图我们看到，如果 $k_0 \leqslant \pi/a$，即，如果

$$V_0 \leqslant V_1 \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{3.16.20}$$

就仅存在一个粒子束缚态. 那么，如果 $V_1 \leqslant V_0 < 4V_1$，就有两个束缚态，等等. 如果 $V_0 \gg V_1$，直线的斜率 $1/k_0$ 就很小. 对于最低的能级，近似地有

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1,2,3,\cdots) \tag{3.16.21}$$

因此

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2} - V_0 \tag{3.16.22}$$

**3.17** 考虑质量为 $m$ 能量 $E>0$ 的粒子被束缚在一维势 $-V_0\delta(x-a)$ 中. (a)在 $a-\varepsilon$ 和 $a+\varepsilon$ 之间积分定态薛定谔方程. 取极限 $\varepsilon\to 0$，证明本征函数 $\phi(x)$ 的导数在 $x=a$ 出现跃变，并确定它；(b)根据 3.7 的(a)，$\phi(x)$ 可以写成

$$\begin{cases}\phi(x) = A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx}, & x < a \\ \phi(x) = A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx}, & x > a\end{cases} \tag{3.17.1}$$

这里 $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$. 计算由

$$\begin{pmatrix}A_2 \\ A'_2\end{pmatrix} = M\begin{pmatrix}A_1 \\ A'_1\end{pmatrix} \tag{3.17.2}$$

定义的矩阵 $M$.

**解** (a) 应用薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2}+V_0\delta(x-a)\phi(x)=E\phi(x) \tag{3.17.3}$$

在 $a-\varepsilon$ 和 $a+\varepsilon$ 之间积分得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x+V_0\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\delta(x-a)\phi(x)\mathrm{d}x=E\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\phi(x)\mathrm{d}x \tag{3.17.4}$$

根据 δ 函数的定义(参看数学附录),积分给出

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a+\epsilon}-\left(\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a-\epsilon}\right)+V_0\phi(a)=E\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\phi(x)\mathrm{d}x \tag{3.17.5}$$

因为 $\phi(x)$在区间$[a-\epsilon,a+\epsilon]$是连续的和有定义的,当取极限 $\epsilon\to 0$ 时有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\lim_{\substack{x\to a\\x>a}}\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}-\lim_{\substack{x\to a\\x<a}}\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right]+V_0\phi(x)=0 \tag{3.17.6}$$

我们看到 $\phi(x)$的导数在 $x=a$ 出现跃变,它等于 $2mV_0\phi(a)/\hbar^2$

(b) 在 $x=a$,我们有两个衔接条件. $\phi(x)$在 $x=a$ 连续给出

$$A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+A'_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+A'_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} \tag{3.17.7}$$

第二个衔接条件在关系(3.17.6)中已经给出,代入 $\phi(x)$的表达式得到

$$\frac{\hbar^2}{2m}(A_1\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-A'_1\mathrm{i}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}-A_2\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+A'_2\mathrm{i}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka})=-V_0(A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+A'_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}) \tag{3.17.8}$$

方程(3.17.6)和(3.17.7)使我们能用 $A_1$ 和 $A'_1$ 表示 $A_2$ 和 $A'_2$

$$\begin{cases}A_2=\left(1+\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2}\right)A_1+\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ka}A'_1\\ A'_2=-\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka}A_1+\left(1-\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2}\right)A'_1\end{cases} \tag{3.17.9}$$

因而,我们有

$$\begin{pmatrix}A_2\\A'_2\end{pmatrix}=M\begin{pmatrix}A_1\\A'_1\end{pmatrix} \tag{3.17.10}$$

这里

$$M=\begin{pmatrix}1+\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2} & +\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ka}\\ -\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka} & 1-\dfrac{mV_0}{\mathrm{i}k\hbar^2}\end{pmatrix} \tag{3.17.11}$$

**3.18** 在本问题中,我们研究被束缚在周期性的 δ 函数势(参看图 3-9)中质量为 $m$ 的粒子可能具有的能量($E>0$).一维势定义为

$$V(x)=\frac{\hbar^2\lambda}{2ma}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-na) \tag{3.18.1}$$

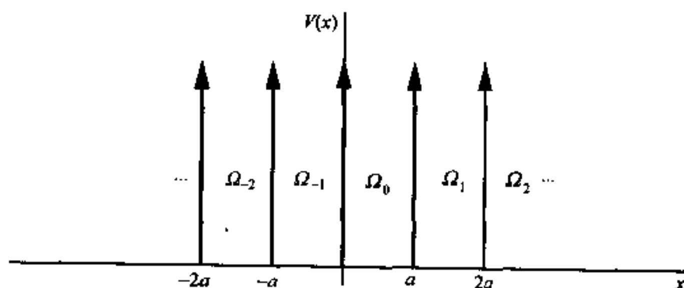



图 3-9

参考问题 3.7 的(a)对于每一个区域 $\Omega_n[na<x<(n+1)a]$,定态解可以写成

$$\phi_n(x)=B_n e^{ik(x-na)}+C_n e^{-ik(x-na)} \tag{3.18.2}$$

(a) 利用问题 3.17 的结果,求区域 $\Omega_{n+1}$对区域 $\Omega_n$ 的关系矩阵

$$\begin{pmatrix}B_{n+1}\\ C_{n+1}\end{pmatrix}=T\begin{pmatrix}B_n\\ C_n\end{pmatrix} \tag{3.18.3}$$

证明 $T$ 不是奇异矩阵;(b)因为 $T$ 是非奇异矩阵,我们可以求出矩阵 $T$ 的本征向量构成的$C^2$ 的基$(\boldsymbol{b}_1\boldsymbol{b}_2)$,我们写出

$$\begin{pmatrix}B_0\\ C_0\end{pmatrix}=\beta_1\boldsymbol{b}_1+\beta_2\boldsymbol{b}_2 \tag{3.18.4}$$

这里 $\beta_1$ 和 $\beta_2$ 是复数.若要求$|B_n|^2+|C_n|^2$ 当 $n\to\pm\infty$时不发散,可以求出对 $T$ 的本征值的限制.用可能的能量 $E$ 表示这种限制.

**解**　(a) 我们将(3.18.2)中 $\phi_n(x)$和 $\phi_{n+1}(x)$的定义和问题 3.17(b)中 $\phi(x)$的定义进行比较.相似之处列在表 3-1 中.

**表 3-1**

| 题 3.17 | 题 3.18 |
|---|---|
| $A_1$ | $B_n e^{-ikna}$ |
| $A'_1$ | $C_n e^{ikna}$ |
| $A_2$ | $B_{n+1}e^{-ik(n+1)a}$ |
| $A'_2$ | $C_{n+1}e^{ik(n+1)a}$ |
| $V_0$ | $\frac{\hbar^2\lambda}{2ma}$ |

此外,两个区域 $\Omega_n$ 和$\Omega_{n+1}$边界设在 $x=(n+1)a$,而在问题 3.17 中边界条件应施加在 $x=a$ 处.利用这一相似性我们有

$$\begin{cases}B_{n+1}e^{-ik(n+1)a}=B_n e^{-ikna}\left(1-\frac{i\lambda}{2ka}\right)-C_n e^{ikna}\left(\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{-2ik(n+1)a}\\ C_{n+1}e^{ik(n+1)a}=B_n e^{-ikna}\left(\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{2ik(n+1)a}+C_n e^{ikna}\left(1+\frac{i\lambda}{2ka}\right)\end{cases} \tag{3.18.5}$$

因而我们有

$$\begin{pmatrix}B_{n+1}\\ C_{n+1}\end{pmatrix}=T\begin{pmatrix}B_n\\ C_n\end{pmatrix} \tag{3.18.6}$$

这里

$$T=\begin{pmatrix}\left(1-\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{ika} & -\frac{i\lambda}{2ka}e^{-ika}\\ +\frac{i\lambda}{2ka}e^{ika} & \left(1+\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{-ika}\end{pmatrix} \tag{3.18.7}$$

我们看到 $T$ 不是奇异矩阵,因为

$$\det T=\left(1+\frac{i\lambda}{2ka}\right)\left(1-\frac{i\lambda}{2ka}\right)+\left(\frac{i\lambda}{2ka}\right)^2=1 \tag{3.18.8}$$

所以 $\det T\neq 0$.

(b) 因为 $T$ 是非奇异矩阵,我们可以求出 $C^2$ 的基$(\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2)$,$C^2$ 由具有相应的本征值 $\alpha_1$ 和 $\alpha_2$ 矩阵 $T$

的本征向量构成. 这些本征值是二次方程 $\det(T-\alpha\mathbf{1})=0$ 的解. 由定义

$$\begin{cases} T\boldsymbol{b}_1 = \alpha_1\boldsymbol{b}_1 \\ T\boldsymbol{b}_2 = \alpha_2\boldsymbol{b}_2 \end{cases} \tag{3.18.9}$$

利用(3.18.4)我们有(对 $n=1,2,\cdots$)

$$\begin{pmatrix} B_n \\ C_n \end{pmatrix} = \underbrace{TT\cdots T}_{n\uparrow}\begin{pmatrix} B_0 \\ C_0 \end{pmatrix} = T^n(\beta_1\boldsymbol{b}_1+\beta_2\boldsymbol{b}_2) = \beta_1\alpha_1^n\boldsymbol{b}_1+\beta_2\alpha_2^n\boldsymbol{b}_2 \tag{3.18.10}$$

考虑

$$|B_n|^2+|C_n|^2 = \left\|\begin{pmatrix} B_n \\ C_n \end{pmatrix}\right\|^2 \geqslant |\beta_1\alpha_1^n|^2\|\boldsymbol{b}_1\|^2 \tag{3.18.11}$$

于是 $|\alpha_1|\leqslant 1$; 否则 $\lim\limits_{n\to\infty}(|B_n|^2+|C_n|^2)=\infty$, 同样, 我们必须有 $|\alpha_2|\leqslant 1$. 我们用同样的方法考虑 $n\to-\infty$ 的情况

$$\begin{pmatrix} B_0 \\ C_0 \end{pmatrix} = T^n\begin{pmatrix} B_{-n} \\ C_{-n} \end{pmatrix}, \qquad n=1,2,\cdots \tag{3.18.12}$$

所以

$$\begin{pmatrix} B^{-n} \\ C_{-n} \end{pmatrix} = T^{-n}\begin{pmatrix} B_0 \\ C_0 \end{pmatrix} = T^{-n}(\beta_1\boldsymbol{b}_1+\beta_2\boldsymbol{b}_2) = \frac{\beta_1}{\alpha_1^n}[T^{-n}(\alpha_1^n\boldsymbol{b}_1)]+\frac{\beta_2}{\alpha_2^n}[T^{-n}(\alpha_2^n\boldsymbol{b}_2)]$$

$$=\frac{\beta_1}{\alpha_1^n}[T^{-n}(T^n\boldsymbol{b}_1)]+\frac{\beta_2}{\alpha_2^n}[T^{-n}(T^n\boldsymbol{b}_2)] = \frac{\beta_n}{\alpha_1^n}\boldsymbol{b}_1+\frac{\beta_2}{\alpha_2^n}\boldsymbol{b}_2^n \tag{3.18.13}$$

于是

$$|B_{-n}|^2+|C_{-n}|^2 = \left\|\begin{pmatrix} B_{-n} \\ C_{-n} \end{pmatrix}\right\|^2 \geqslant \left|\frac{\beta_1}{\alpha_1^n}\right|^2\|\boldsymbol{b}_1\|^2 \tag{3.18.14}$$

这样 $|\alpha_1|\geqslant 1$; 否则当 $n\to-\infty$ 时 $|\varphi_n(x)|^2$ 发散, 同样, 我们必须有 $|\alpha_2|\geqslant 1$. 汇总我们的结果, 就必须 $|\alpha_1|=|\alpha_2|=1$, 即 $T$ 的本征值必须是模为 1 的数. 因而我们可以写出

$$\det(T-e^{i\phi}\mathbf{1})=0 \tag{3.18.15}$$

这里 $\phi$ 是实常数, 于是

$$\left[\left(1-\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{ika}-e^{i\phi}\right]\left[\left(1+\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{-ika}-e^{i\phi}\right]-\frac{\lambda^2}{(2ka)^2}=0 \tag{3.18.16}$$

整理(3.18.16)给出

$$\left(1+\frac{\lambda^2}{4k^2a^2}\right)-\left[\left(1-\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{ika}+\left(1+\frac{i\lambda}{2ka}\right)e^{-ika}\right]e^{i\phi}+e^{2i\phi}-\frac{\lambda^2}{(2ka)^2}=0 \tag{3.18.17}$$

或

$$1-2\left[\cos(ka)+\frac{\lambda}{2ka}\sin(ka)\right]e^{i\phi}+e^{2i\phi}=0 \tag{3.18.18}$$

考虑(3.18.18)的实部

$$1-2\left[\cos(ka)+\frac{\lambda}{2ka}\sin(ka)\right]\cos\phi+\cos(2\phi)=0 \tag{3.18.19}$$

利用关系式 $\cos(2\phi)=2\cos^2\phi-1$, 我们得到

$$\cos\phi=\cos(ka)+\frac{\lambda}{2ka}\sin(ka) \tag{3.18.20}$$

注意, 因为 $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$, (3.18.20)是施加给可能能量 $E$ 的限制.

$$\left|\cos(ka)+\frac{\lambda}{2ka}\sin(ka)\right|\leqslant 1 \tag{3.18.21}$$

我们可以用如下图示方法表示该不等式,函数

$$f(k)=\cos(ka)+\frac{\lambda}{2ka}\sin(ka) \tag{3.18.22}$$

当 $k\to\infty$ 时其行为近似为 $\cos(ka)$. 图 3-10 给出 $f(k)$ 的示意图.

我们看到有一个被 $|f(k)|\geqslant1$ 区域隔开的可能能量容许带,因而相应的能量 $E$ 并不对应一个可能的态. 当 $E\to\infty$,禁带就变得很窄,能量谱几乎是连续的.

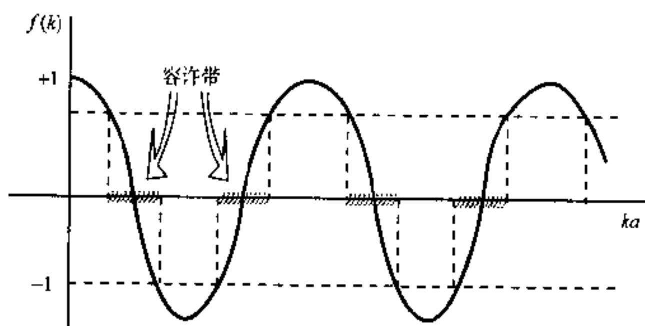



图 3-10

**3.19** 考虑质量为 $m$ 的粒子束缚在形为

$$\widetilde{V}(x,y,z)=V(x)+U(y)+W(z) \tag{3.19.1}$$

的三维势中,推导出该情况的定态薛定谔方程,分离变数以得到三个独立的一维问题. 建立三维态能量和一维问题有效能量的关系.

**解答** 在本问题中,定态薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r})+[V(x)+U(y)+W(z)]\Psi(\boldsymbol{r})=E\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{3.19.2}$$

这里 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 是三维定态波函数,而 $E$ 是态的能量. 我们假设 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 可以写成 $\Psi(\boldsymbol{r})=\phi(x)\chi(y)\psi(z)$ 的形式. 代入(3.19.2)给出

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2}\right)\chi(y)\psi(z)+\phi(x)\left(\frac{\mathrm{d}^2\chi(y)}{\mathrm{d}y^2}\right)\psi(z)+\phi(x)\chi(y)\left(\frac{\mathrm{d}^2\psi(z)}{\mathrm{d}z^2}\right)\right]$$
$$+[V(x)+U(y)+W(z)]\phi(x)\chi(y)\psi(z)=E\phi(x)\chi(y)\psi(z) \tag{3.19.3}$$

(3.19.3)除以 $\psi(\boldsymbol{r})$ 并分离出对变数 $x$ 依赖关系的部分,我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2}+V(x)=E-\left[U(y)+W(z)-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\chi(y)}\frac{\mathrm{d}^2\chi(y)}{\mathrm{d}y^2}+\frac{1}{\psi(z)}\frac{\mathrm{d}^2\psi(z)}{\mathrm{d}z^2}\right)\right] \tag{3.19.4}$$

(3.19.4)的左边仅是 $x$ 的函数,而右边是 $y$ 和 $z$ 的函数;但不依赖于 $x$. 因此,方程的两边不可能依赖于 $x$,因而它们等于一个常数. 我们记为 $E_x$. 于是有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\phi(x)=E_x\phi(x) \tag{3.19.5}$$

我们看到 $\phi(x)$ 满足的方程描述被束缚在一维势 $V(x)$ 中质量为 $m$ 的粒子. 回到(3.19.4),我们可以写出

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\chi(y)}\frac{\mathrm{d}^2\chi(y)}{\mathrm{d}y^2}+U(y)=E-E_x-\left[W(z)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(z)}\frac{\mathrm{d}^2\psi(z)}{\mathrm{d}z^2}\right] \tag{3.19.6}$$

在(3.19.6)中,左边仅依赖于 $y$,而右边仅依赖于 $z$. 方程的两边必须等于一个常数,我们记之为 $E_y$,于是有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\chi(y)}{\mathrm{d}y^2}+U(y)\chi(y)=E_y\chi(y) \tag{3.19.7}$$

因而 $x(y)$ 是束缚在一维势 $U(y)$ 中的假想粒子的定态波函数.最后,我们有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}+W(z)\psi(z)=E_z\psi(z) \tag{3.19.8}$$

这里 $E_z=E-E_x-E_y$.所以,三维波函数 $\psi(r)$ 分成三个部分.每一个部分满足一个一维薛定谔方程.三维态能量等于相应的三个一维定态问题能量之和.$E=E_x+E_y+E_z$.

## 补充习题

**3.20** 粒子具有能量 $0<E<V_0$ 的情况下,求解 3.11 和 3.12 题.

**答案**　$R=1$ 和 $T=0$.

**3.21** 考虑粒子被束缚在一维复数势 $V(x)(1+i\xi)$ 中,这里 $V(x)$ 是实函数,$\xi$ 是实参量.利用薛定谔方程证明:概率流 $j=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$ 和概率密度 $\rho=\psi^*\psi$ 满足修正过的连续性方程 $\frac{\partial j}{\partial x}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{2\xi V(x)\rho}{\hbar}$.(提示:和问题 3.4 进行比较.)

**3.22** 考虑质量为 $m$ 的粒子被束缚在一维无限势阱中:

$$V(x)=\begin{cases}V_0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ \infty\end{cases} \tag{3.22.1}$$

求定态波函数和相应的能量.

**答案**　$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}+V_0$ 相应的定态波函数和问题 3.10 的相同.

**3.23** 能量为 1eV 的电子遇到宽度为 1Å 能量宽度为 2eV 的势垒,电子穿越势垒的概率是多少? 对质子重复同样的计算.

**答案**:对电子 $T\cong 0.78$;对质子 $T\cong 4\times10^{-19}$.

**3.24** (a) 质量为 $m$ 能量 $E>0$ 的粒子碰到宽为 $l$ 深为 $V_0$ 的势阱:

$$V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ -V_0, & 0<x<l\\ 0, & l<x\end{cases} \tag{3.24.1}$$

求透射系数(提示:和问题 3.14 作比较);(b)如果对能量是 1eV 的电子 $V_a=4$eV,$l$ 取何值时,是完全透射?

**答案**　(a) $T=\cfrac{1}{1+\cfrac{V_0^2}{4E(E+V_0)}\sin^2\left[\cfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}\,l}{\hbar}\right]}$

(b) $l\cong 2.7n$Å,这里 $n$ 是整数.

**3.25** 一个电子被束缚在宽度为 1Å 的有限矩形势阱中,阱深为何值时,该电子存在两个束缚定态.

**答案**　$V_1\leqslant V_0\leqslant 4V_1$,这里 $V_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=37.6$eV.

**3.26** 考虑波函数 $\psi(x)=\frac{N}{x^2+a^2}$,(a) 计算归一化常数 $N$,这里 $a$ 是实数.

(b) 求测不准量 $\Delta x\Delta p$(在计算 $\Delta p$ 时要小心!)

**答案**　(a) $N=\sqrt{\frac{2a^2}{\pi}}$;(b) $\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$.

**3.27** 能量 $E>0$ 的粒子被限制在势场中(图 3-11)

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<-a\\ 0, & -a<x<-b\\ V_0, & -b<x<b\\ 0, & b<x<a\\ \infty, & a<x\end{cases} \tag{3.27.1}$$

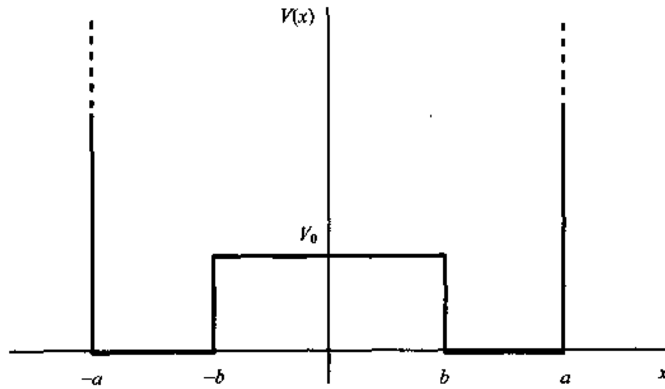



图 3-11

证明：对于在势垒右边（即 $b<x<a$）找到粒子概率不为零的定态，也存在一个在势垒左边（即 $-a<x<-b$）找到粒子的非零概率. 注意：对于 $E<V$. 这是隧道效应的另一个例子

**3.28**　考虑质量为 $m$ 的粒子被限制在一维无限深势阱中：

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<L\\ \infty, & 其他\end{cases} \tag{3.28.1}$$

假设粒子处于能量为 $E_n=\dfrac{\pi^2\hbar^2h^2}{2mL^2}$ 的定态 $\phi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{L}\right)$ 计算：

(a) $\langle x\rangle$ 和 $\langle p\rangle$；(b) $\langle x^2\rangle$ 和 $\langle p^2\rangle$；(c) $\Delta x\Delta p$

**答案**　(a) $\langle x\rangle=\dfrac{L}{2}$，$\langle p\rangle=0$；(b) $\langle x^2\rangle=L^2\left(\dfrac{1}{3}-\dfrac{1}{2\pi^2n^2}\right)$，$\langle p^2\rangle=\dfrac{\pi^2\hbar^2n^2}{L^2}$；(c) $\Delta x\Delta p=n\pi\hbar\sqrt{\dfrac{1}{12}-\dfrac{1}{2\pi^2n^2}}$

**3.29**　设质量为 $m$ 的粒子被束缚在势

$$V(x)=-V_0[\delta(x)+\delta(x-l)] \tag{3.29.1}$$

中，这里 $l$ 是常数，求粒子的束缚态. 证明：能量由关系式

$$e^{-\rho l}=\pm\left(1-\frac{2\rho}{\alpha}\right) \tag{3.29.2}$$

给出，这里 $E=-\hbar^2\rho^2/2m$，$\alpha=2mV_0/\hbar^2$

# 第四章 量子力学基础

## 4.1 导论

态空间：在经典力学中，粒子的位置是用具有三个分量的矢量来描述的. 在量子力学中，虽然仍存在类似的描述，但有许多重要的区别. 一个量子力学体系的态是用态空间的一个元素来描述的. 态空间是一个抽象的矢量空间记为 $\varepsilon$. 在狄拉克符号表示法中，态空间的一个元素称为右矢，用符号 $|\rangle$ 表示.

可观测量：在第二章中引入了线性算符的概念. 厄米算符是一个线性算符，它等于它的伴随算符（参看 4.6 节）. 量子力学中一个重要概念是可观测量. 一个可观测量是一个厄米算符，对厄米算符可以求出态空间的一组幺正基，由算符的本征矢量构成. 如果态空间是有限维的，那么任何厄米算符都是一个可观测量，在狄拉克符号法中，一个算符用一个字母表示，因为一个算符作用于一个矢量产生另一个矢量，形为 $A|\psi\rangle$ 的表达式也代表一个右矢.

对偶空间：回想起一个泛函是从矢量空间到复数域的一个映射. 态空间 $\varepsilon$ 的对偶空间由作用于 $\varepsilon$ 所有线性泛函构成. 它用符号 $\varepsilon^*$ 标记. 在狄拉克符号法中，$\varepsilon^*$ 的一个元素称为左矢，用符号 $\langle|$ 标记，我们可以给 $\varepsilon$ 中的任何右矢 $|\varphi\rangle$ 指定一个 $\varepsilon^*$ 的元素，记为 $\langle\varphi|$，左矢 $\langle\varphi$ 对右矢 $|\chi\rangle$ 的作用可以用两个符号的并置 $\langle\varphi|\chi\rangle$ 表示. 根据定义，这种表示是一个复数. [术语 bra（左矢）和 ket（右矢）来自 brac ket（括号）]、$\varepsilon$ 和 $\varepsilon^*$ 对偶性和 $\varepsilon$ 中的标量积存在密切相关.

标量积：标量积的性质摘要如下：

$$\text{I}\quad \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \tag{4.1}$$

$$\text{II}\quad \langle\psi|\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2\rangle = \lambda_1\langle\psi|\phi_1\rangle + \lambda_2\langle\phi_2|\psi\rangle \tag{4.2}$$

$$\text{III}\quad \langle\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\phi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\phi_2|\psi\rangle \tag{4.3}$$

$$\text{IV}\quad \langle\psi|\psi\rangle \text{ 是正实数，当且仅当 } |\psi\rangle = 0, \langle\psi|\psi\rangle = 0 \tag{4.4}$$

到 $\varepsilon$ 子空间的投射：令 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots |\phi_m\rangle$ 是 $m$ 个归一化的相互正交矢量

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}, \qquad i,j = 1,2,\cdots,m \tag{4.5}$$

我们用 $\varepsilon_m$ 表示这 $m$ 个矢量所张的 $\varepsilon$ 的子空间. 到子空间 $\varepsilon_m$ 的投影用线性算符定义为

$$P_m = \sum_{i=1}^{m} |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \tag{4.6}$$

图 4-1 给出这一概念的简单例子. 一组右矢 $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}$ 是一组幺正矢量. 任意矢量 $|\psi\rangle$ 在 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 构成的平面上的投影由 $P_2|\psi\rangle = (\langle\phi_1|\psi\rangle)|\phi_1\rangle + (\langle\phi_2|\psi\rangle)|\phi_2\rangle$ 给出.

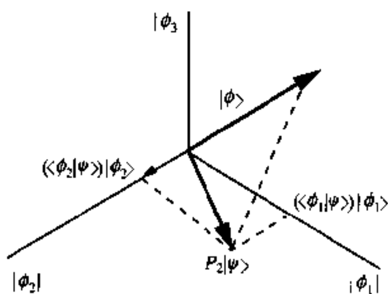



图 4-1

## 4.2 量子力学中的基本假设

假设 I：物理体系在 $t_0$ 时刻的态用属于态空间 $\varepsilon$ 的特定右矢 $|\psi(t_0)\rangle$ 定义，

假设 II：一个可测量的物理量 $A$ 用作用在 $\varepsilon$ 上的可观测量 $A$ 描述.

物理量的测量：物理理论的有效程度始终受到理论计算结果和实验测量结果对比的检验.

从量子力学的角度看,物理量的测量涉及到三个基本问题:

(a) 测量的可能结果是什么?

(b) 获得每一个可能结果的概率是多大?

(c) 测量后体系的状态是什么?

量子力学对这些问题的回答基于如下三条假设.

假设Ⅲ:一个物理量测量的可能结果是相应的可观测量的本征值.

现在我们在分离谱情况回答第二个问题.一般的连续谱情况在问题4.2中处理.

假设Ⅳ:令 $A$ 是一个具有可观测量 $A$ 的物理量.假设体系处于归一化态 $|\psi\rangle$,于是 $\langle\psi|\psi\rangle=1$.当 $A$ 被测量时,获得 $A$ 的本征值 $a_n$ 的概率 $P(a_n)$ 是

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi\rangle|^2 \tag{4.7}$$

这里 $g_n$ 是 $a_n$ 的简并度,而 $|u_n^1\rangle|u_n^2\rangle,\cdots,|u_n^{g_n}\rangle$ 构成子空间 $\varepsilon_n$ 的一组正交基,$\varepsilon_n$ 由 $A$ 的属于本征值 $a_n$ 的本征向量构成.

在问题4.3中,我们引入假设Ⅳ的微分公式.假设Ⅳ中定义的态空间的子空间也称为与本征值 $a_n$ 连带的本征空间.下面的假设描述测量后体系的态.

假设Ⅴ:如果量 $A$ 在物理体系处于态 $|\psi\rangle$ 的测量结果是 $a_n$,测量后的瞬间,体系的态由 $|\psi\rangle$ 在与 $a_n$ 连带的本征空间 $\varepsilon_n$ 的归一化投影给出;即 $\frac{1}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}P_n|\psi\rangle$,这里 $P_n$ 是 $\varepsilon_n$ 上的投影.

### 4.3 平均值和方差

考虑一个归一化的右矢描述的态,$\langle\psi|\psi\rangle=1$.可观测量 $A$ 在态 $|\psi\rangle$ 的平均值定义为

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi | A | \psi\rangle \tag{4.8}$$

一个可观测量的平均值具有明确的物理意义.假设当系统处于态 $|\psi\rangle$,由算符 $A$ 代表的物理量被测量很多很多次,那么 $\langle A\rangle_\psi$ 表示测量结果的平均值.(即每个结果乘以得到它的概率之和).这种性质的偏差在问题4.5中给出.

可观测量的均方根差定义为

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle_\psi - \langle A\rangle_\psi^2} \tag{4.9}$$

均方根差具有直接的物理解释.它刻画了测量结果对平均值 $\langle A\rangle_\psi$ 偏离程度.

### 4.4 对易可观测量

考虑两个算符,$A$ 和 $B$.一般说来,表达式 $AB$ 和 $BA$ 是不相等的——算符相乘是不对易的.量子力学中一个重要的概念是两个算符的对易子 $[A,B]$,定义为

$$[A,B] = AB - BA \tag{4.10}$$

对易子的一些有用的性质在问题4.7、4.8和4.9中给出,如果 $[A,B]=0$,那么 $A$ 和 $B$ 就称为对易算符.考虑如下的定理.

**定理**　当且仅当对可观测量 $A$ 和 $B$ 两者存在共同的本征值基,则 $A$ 和 $B$ 对易.

一组可观测量 $A$、$B$、$C$…称为一个对易可观测量的完全集,如果这些可观测量彼此对易,并且它们的共同本征矢量存在惟一的正交归一基.该惟一性可以相差一个乘数因子.

### 4.5 算符的函数

假设在一个确定的区间上自变量为 $x$ 的函数 $F$ 可以展开成 $x$ 的幂级数

$$F(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n x^n \tag{4.11}$$

算符 $A$ 的相应函数 $F(A)$ 是用级数定义的算符 $F(A)$，级数具有相同的系数 $a_n$

$$F(A)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n A^n \tag{4.12}$$

### 4.6 厄米共轭

算符 $A$ 的伴随(或共轭)记为 $A^\dagger$. 对于每一个 $|\phi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$，我们有

$$\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle=\langle\phi|A|\psi\rangle^* \tag{4.13}$$

伴随算符的基本性质将在问题 4.10 和 4.11 中推导出. 如果一个算符 $A$ 和其伴随完全相等，它就是厄米算符：

$$A\text{ 是厄米算符}\Leftrightarrow A=A^\dagger \tag{4.14}$$

审察方程(4.13)不难发现，要得到任何表达式的厄米共轭，使用如下的步骤就足够了.

Ⅰ 常数用其复共轭代替；
右矢用其相应左矢代替；
左矢用其相应右矢代替；
算符用其伴随代替.

Ⅱ 颠倒因子的次序(常数的位置是无紧要的). 例如

$$\lambda\langle\phi|AB|\psi\rangle\to\lambda^*\langle\psi|B^\dagger A^\dagger|\phi\rangle \tag{4.15}$$

### 4.7 离散的和连续的态空间基

一组离散右矢 $\{|u_i\rangle, i=1,2,\cdots\}$ 是正交归一化的，如果它满足下面的关系

$$\langle u_i|u_j\rangle=\delta_{ij} \tag{4.16}$$

对于一组连续的右矢 $\{|w_\alpha\rangle, l_1\leqslant\alpha\leqslant l_2\}$，正交归一化关系写成

$$\langle w_\alpha|w_{\alpha'}\rangle=\delta(\alpha-\alpha') \tag{4.17}$$

一组右矢构成态空间 $\varepsilon$ 的基，如果，属于 $\varepsilon$ 的每一个右矢 $|\psi\rangle$ 对这些右矢有惟一的展开式：

$$|\psi\rangle=\sum_i C_i|u_i\rangle \tag{4.18}$$

对连续情况

$$|\psi\rangle=\int C(\alpha)|w_\alpha\rangle\mathrm{d}\alpha \tag{4.19}$$

可以证明，一组正交归一化的右矢构成基，当且仅当它满足闭合关系(参看问题 4.13 和 4.14)

$$\sum_i|u_i\rangle\langle u_i|=1\quad\left(\text{在连续情况}\int|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\mathrm{d}\alpha=1\right) \tag{4.20}$$

这里 1 代表 $\varepsilon$ 中的全同算符. 利用向该组右矢构成的空间投影的表示方法，我们可以将这些关系写成等效的形式

$$P\{u_i\}=1\quad(\text{或者 }P\{w_\alpha\}=1) \tag{4.21}$$

### 4.8 表象

物理理论的正确性是靠比较实验获得的数据和理论计算出的数据建立起来的.当在抽象的态空间选定一组基时,每一个右矢、左矢和算符都可以用它们在这组基上的坐标表示.我们说抽象的东西是用相应的一组数表示的.利用这些数,理论描述的计算得以进行.选择表象意味着在态空间选择一套正交归一化的基.

右矢和左矢的表示:就离散基而言,右矢$|\psi\rangle$用一组数$C_i=\langle u_i|\psi\rangle$表示,这些数可以以矩阵形式排成列

$$(C_i) = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{4.22}$$

一个左矢$\langle\phi|$可以用一组数$b_i^*=\langle\phi|u_i\rangle$表示,它们是与$\langle\phi|$相应的右矢$|\phi\rangle$的分量的复共轭.这些数可以安排为矢量$(b_1^*,b_2^*\cdots b_n^*)$,在连续基$\{|w_\alpha\rangle\}$情况,右矢和左矢用连续的无穷多个数表示.也就是说,用$\alpha$的函数表示.右矢$|\psi\rangle$用一组数$C(\alpha)=\langle w_\alpha|\psi\rangle$表示,而左矢$\langle\phi|$用$b^*(\alpha)=\langle\phi|w_\alpha\rangle$表示.一旦表象选定,我们可以用右矢和左矢的分量去计算它们的标量积.在离散情况

$$\langle\phi\mid\psi\rangle = \sum_i b_i^* C_i \quad [\text{在连续情况}\langle\phi\mid\psi\rangle = \int b^*(\alpha)C(\alpha)\mathrm{d}\alpha] \tag{4.23}$$

算符的表示:在离散基$\{|u_i\rangle\}$情况,一个算符可以用数

$$A_{ij} = \langle u_i \mid A \mid u_j\rangle \tag{4.24}$$

表示.这组数可以重新排成方阵

$$[A_{ij}] = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12}\cdots & A_{1j}\cdots \\ A_{21} & A_{22}\cdots & A_{2j}\cdots \\ \vdots & & \\ A_{i1} & A_{i2}\cdots & A_{ij}\cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \tag{4.25}$$

对于连续基$\{|w_\alpha\rangle\}$,我们用一个两个自变量的连续函数和$A$连结.

$$(\alpha,\alpha') = \langle w_\alpha \mid A \mid w_{\alpha'}\rangle \tag{4.26}$$

作为4.13的结果

$$(A^\dagger)_{ij} = A_{ij}^* \tag{4.27}$$

或

$$A^\dagger(\alpha',\alpha) = A^*(\alpha',\alpha) \tag{4.28}$$

如果$A$是厄米算符$(A^\dagger=A)$,我们有$A(\alpha',\alpha)=A^*(\alpha',\alpha)$(注意在离散情况$A_{ij}=A_{ij}^*$),在特别情况,厄米矩的对角元素总是实数.

表象变换:我们提供一个简单的方法,当左矢,右矢和算符在另一组基下表示已知时,求出它们在给定基下的表示.为简单起见,假设我们完成从一组分离的正交归一化基$\{|u_i\rangle\}$到另一

组$\{|v_i\rangle\}$的变换.定义变换矩阵为

$$S_{ik}=\langle u_i\mid v_k\rangle \tag{4.29}$$

$S_{ik}$的厄米共轭由

$$(S^{\dagger})_{ki}=(S_{ik})^*=\langle v_k\mid u_i\rangle \tag{4.30}$$

给出.要将右矢$|\psi\rangle$在一组基下的分量变为在另一组基下的分量,只要应用变换关系式

$$\langle v_k\mid\psi\rangle=\sum_i(S^{\dagger})_{ki}\langle u_i\mid\psi\rangle \tag{4.31}$$

或逆变换关系式,$\langle u_i|\psi\rangle=\sum_k S_{ik}\langle v_k|\psi\rangle$,对于左矢$\langle\phi|$,我们有

$$\langle\phi\mid v_k\rangle=\sum_i\langle\phi\mid u_i\rangle S_{ik}\quad\left[\langle\phi\mid u_i\rangle=\sum_k\langle\phi\mid v_k\rangle(S^{\dagger})_{ki}\right] \tag{4.32}$$

最后,算符$A$的矩阵元素变换为

$$\langle v_k\mid A\mid v_l\rangle=\sum_{i,j}(S^{\dagger})_{ki}\langle u_i\mid A\mid u_j\rangle S_{jl},\langle u_i\mid A\mid u_j\rangle=\sum_{k,l}S_{ik}\langle v_k\mid A\mid v_l\rangle(S^{\dagger})_{lj} \tag{4.33}$$

$|\boldsymbol{r}\rangle$和$|p\rangle$-表象:在第4.1节,我们注意到对每一个右矢$|\phi\rangle$,都有一个相应的左矢$\langle\phi|$.但反过来说未必如此.有一些左矢没有相应的右矢*.更何况,对属于$\varepsilon$的矢量,我们将使用一般化的右矢,它们的模不是有限的.但同时,这些右矢和每一个左矢的标量积是有限的.这种一般化的右矢不代表物理态.它们能帮助我们分析和解释属于$\varepsilon$的右矢代表的物理态.

考虑单个粒子的物理体系.和系统的态空间一起,我们引入另外一个矢量空间,称为波函数空间,记为$F$.该空间由坐标$(x,y,z)$的复函数构成,复函数具有如下的性质:

(a) 函数$\psi(\boldsymbol{r})$在任何一点都有定义,连续和无限阶可导.

(b) 积分$\int|\psi(\boldsymbol{r})|^2\mathrm{d}^3r$必须是有限的,即$\psi(\boldsymbol{r})$必须平方可积的.

对属于$F$的每一个函数$\psi(\boldsymbol{r})$都有一个属于$\varepsilon$的右矢$|\psi\rangle$与之对应.应用与函数$\phi(\boldsymbol{r})$和$\psi(\boldsymbol{r})$对应的$\langle\phi|$和$|\psi\rangle$,我们定义$\langle\phi|$和$|\psi\rangle$的标量积为

$$\langle\phi\mid\psi\rangle=\int\phi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r \tag{4.34}$$

考虑$F$的两组特殊基,记为$\{\xi_{r_0}(\boldsymbol{r})\}$和$\{V_{p_0}(\boldsymbol{r})\}$.这些基不构成属于$F$的函数.

$$\xi_{r_0}(\boldsymbol{r})=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0) \tag{4.35}$$

和

$$V_{p_0}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{4.36}$$

对每一个$\xi_{r_0}(\boldsymbol{r})$,与之关连一个一般化的右矢记为$|\boldsymbol{r}_0\rangle$,同样,对于$V_{p_0}(\boldsymbol{r})$我们与之关连一个一般化的右矢$|\boldsymbol{p}_0\rangle$.$\{|\boldsymbol{r}_0\rangle\}$和$\{|\boldsymbol{p}_0\rangle\}$构成$\varepsilon$中的正交归一基

$$\langle\boldsymbol{r}_0\mid\boldsymbol{r}_0'\rangle=\delta(\boldsymbol{r}_0-\boldsymbol{r}_0'),\quad\int|\boldsymbol{r}_0\rangle\langle\boldsymbol{r}_0|\mathrm{d}^3\gamma=1 \tag{4.37}$$

这里,我们还有如下的关系式:

$$\langle p_0\mid p_0'\rangle=\delta(p_0-p_0'),\qquad\int|p_0\rangle\langle p_0|\mathrm{d}^3p=1 \tag{4.38}$$

---

* 对此问题感兴趣的读者可在标准"泛函分析"教材中找到关于这一问题的讨论——译者注.

我们得到(无自旋)粒子在态空间的两个表示:$\{|\boldsymbol{r}_0\rangle\}$和$\{|\boldsymbol{p}_0\rangle\}$表象.

右矢$|\psi\rangle$和与之关连的波函数.两者间的对应关系由

$$\psi(\boldsymbol{r}_0) = \langle \boldsymbol{r}_0 | \psi \rangle \tag{4.39}$$

以及

$$\overline{\psi}(\boldsymbol{p}_0) = \langle \boldsymbol{p}_0 | \psi \rangle \tag{4.40}$$

给出,这里$\overline{\psi}(\boldsymbol{p})$是$\psi(\boldsymbol{r})$的傅里叶变换.波函数在点$\boldsymbol{r}$的值$\psi(\boldsymbol{r})$是右矢$|\psi\rangle$在$|\boldsymbol{r}\rangle$表象的基矢量$|\boldsymbol{r}\rangle$上的分量.同样的,波函数在动量空间的$\boldsymbol{p}$点的值$\overline{\psi}(\boldsymbol{p})$是右矢$|\psi\rangle$在$|\boldsymbol{p}\rangle$表象的基矢量$|\boldsymbol{p}\rangle$上的分量.$|\boldsymbol{r}\rangle$表象和$|\boldsymbol{p}\rangle$表象之间的变换可仿照连续基的情况完成.注意

$$\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{p} \rangle = \langle \boldsymbol{p} | \boldsymbol{r} \rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{4.41}$$

现在,我们有

$$\langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle = \int \langle r | p \rangle \langle p | \psi \rangle d^3 p \tag{4.42}$$

相反

$$\langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle = \int \langle p | r \rangle \langle r | \psi \rangle d^3 r \tag{4.43}$$

于是,利用(4.41),我们得到

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \overline{\psi}(\boldsymbol{p}) d^3 p \tag{4.44}$$

和

$$\overline{\psi}(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \psi(\boldsymbol{r}) d^3 r \tag{4.45}$$

**算符 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{p}$**:令$|\psi\rangle$是属于态空间的一个右矢,$\psi(x,y,z)=\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle=\psi(\boldsymbol{r})$是其相应的波函数.三个可观测量$X$、$Y$、$Z$用它们在$|\boldsymbol{r}\rangle$表象中的作用来定义

$$\langle \boldsymbol{r} | X | \psi \rangle = x \langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle, \quad \langle \boldsymbol{r} | Y | \psi \rangle = y \langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle, \quad \langle \boldsymbol{r} | Z | \psi \rangle = z \langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle \tag{4.46}$$

算符$X$作用于右矢$|\psi\rangle$得到右矢$|\psi'\rangle$,它对应于波函数$\psi'(x,y,z)=x\psi(x,y,z)$,对算符$Y$和$Z$亦有同样的表达式,算符$X$、$Y$和$Z$被认为矢量算符$\boldsymbol{R}$的分量.同样,算符$P_x$、$P_y$、$P_z$也用它们在$|\boldsymbol{p}\rangle$表象的作用定义

$$\langle \boldsymbol{p} | P_x | \psi \rangle = p_x \langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle, \quad \langle \boldsymbol{p} | P_y | \psi \rangle = p_y \langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle, \quad \langle \boldsymbol{p} | P_z | \psi \rangle = p_z \langle \boldsymbol{p} | \psi \rangle \tag{4.47}$$

$P_x$、$P_y$、$P_z$是矢量算符$\boldsymbol{p}$的分量.在量子力学中,可观测量$\boldsymbol{R}$和$\boldsymbol{p}$是至关重要的,它们的对易关系称为正则对易关系

$$[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}, \qquad [R_i, R_j] = 0, \qquad [P_i, P_j] = 0 \tag{4.48}$$

**量子化规则**:量子化规则意味着一种方法,用这种方法我们能得到经典量的量子力学模拟.考虑单个粒子的体系,可观测量$(X,Y,Z)$和粒子的坐标$(x,y,z)$相关连,可观测量$(P_x,P_y,P_z)$和粒子的动量$(P_x,P_y,P_z)$相关连我们将常常用符号$\boldsymbol{R}$代表$(X,Y,Z)$,用符号$\boldsymbol{P}$代表$(P_x,P_y,P_z)$.在经典力学中,和一个粒子有关的物理量用粒子的位置矢量$\boldsymbol{r}$和动量$\boldsymbol{p}$表示.要获得相应的量子力学可观测量,将$\boldsymbol{r}$代以$\boldsymbol{R}$,将$\boldsymbol{p}$代以$\boldsymbol{p}$,因为所得表达式不总是厄米式,我们利用

**R** 和 **p** 之间的对称化操作以得到一个厄米算符. 在问题 4.29,我们阐述这种方法. 注意,量子力学中还存在没有经典量与之对应的物理变量(像自旋). 这些量都用相应的可观测量定义.

## 4.9 时间演化

在前面几节,我们没有注意体系的时间演化而宁可认为它是确定的定态,现在我们应当给出处理时间演化体系的方法,考虑如下的假设:物理体系态矢量的时间演化满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle \tag{4.49}$$

这里 $H(t)$是可观测量相应于体系的经典哈密顿量

薛定谔方程的一些重要含义必须引起注意:

(a) 因为薛定谔方程是时间 $t$ 的一阶微分方程,如果初态给定,$|\psi(t)\rangle$就被确定,因而时间演化就被确定,注意,仅当物理量被测量时,才会呈现不确定性.

(b) 令$|\psi_1(t)\rangle$和$|\psi_2(t)\rangle$是薛定谔方程的两个不同解. 如果初态是$|\psi(t_0)\rangle = a_1|\psi_1(t_0)\rangle + a_2|\psi_2(t_0)\rangle$,这里 $a_1$ 和 $a_2$ 是复数,那么,在时刻 $t$,体系处于态$|\psi(t)\rangle = a_1|\psi_1(t)\rangle + a_2|\psi_2(t)\rangle$

(c) 在时刻 $t$,态矢量的模保持常数

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 0 \tag{4.50}$$

这意味着找到粒子的总概率是守恒的.(参看问题 4.34)

保守体系的时间演化

一个物理系统称为保守系,如果它的哈密顿量明显地不依赖于时间,在经典力学,这种体系的最重要结果是能量守恒,同样,在量子力学中,这种保守系统也具有重要的性质,本书的绝大多数问题都是有关保守体系的.

保守体系的时间演变可以用更简单的方法求出,假设哈密顿量 $H$ 不显含时间. 系统的初态为$|\psi(t_0)\rangle$,其时间演变用下述方法求出:

(a) 将$|\psi(t_0)\rangle$用 $H$ 的本征矢量作为基展开

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n \sum_k a_{nk}(t_0)|\phi_{nk}\rangle \tag{4.51}$$

这里 $a_{nk}(t_0) = \langle\phi_{n,k}|\psi(t_0)\rangle$

(b) 要求出 $t > t_0$ 的$|\psi(t)\rangle$来,将每一个系数 $a_{nk}(t_0)$乘以 $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$,这里 $E_n$ 是$H$ 的与态$|\phi_{n|k}\rangle$连结的本征值.

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \sum_k a_{nk}(t_0)e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\phi_{n,k}\rangle \tag{4.52}$$

这一过程,可以推广到 $H$ 连续谱的情况,于是

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k \int ak(E,t_0)e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\phi_{E,k}\rangle dE \tag{4.53}$$

$H$ 的本征态称为定态.

平均值的时间演化:令$|\psi(t)\rangle$为正交归一化的右矢,它描述物理体系的时间演变. 可观测量 $A$ 的平均值的时间演变满足方程

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H(t)]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle \tag{4.54}$$

如果 $A$ 不显含时间,我们有

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[A,H(t)]\rangle \tag{4.55}$$

根据定义,运动常量是可观测量 $A$. 它不显含时间,并且和哈密顿量对易,在这种情况

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=0 \tag{4.56}$$

### 4.10 测不准关系

如同我们在前几节看到的那样,在量子力学中.粒子的位置或动量不是用一个数而是用一个连续函数刻画.所谓粒子位置(或动量)的测不准,是指波函数相对其中心值的离散程度.这个量可以明确定义,但这件事情已超出本书的范围.

海森伯测不准关系给出粒子位置和动量测不准量乘积的下限.

$$\Delta x\Delta p_x\geqslant\hbar/2,\qquad \Delta y\Delta p_y\geqslant\hbar/2,\qquad \Delta z\Delta p_z\geqslant\hbar/2 \tag{4.57}$$

对于保守体系,也有一个时间测不准量 $\Delta t$(在此 $\Delta t$ 内系统在一个适当的范围内演化)和能量测不准量 $\Delta E$ 的关系

$$\Delta t\Delta E\geqslant\hbar \tag{5.58}$$

这个关系和海森伯测不准关系的不同之处在于:$t$ 仅是一个参量,没有相应的可观测量.

### 4.11 薛定谔图像和海森伯图像

在前几节描述的公式中,我们讨论了不显含时间的算符,它们对应于体系的可观测量.在态矢量$|\psi(t)\rangle$中,完全包含了时间演变.这种途径称为薛定谔图像.另外,由于量子力学中的物理预言是用算符矩阵元的左矢和右矢的标量积表示的,就可能引入另一套形式.这套形式称为海森伯图像,在这套形式中,系统的时间演变的公态用右矢描述,它不随时间变化,$|\psi_H(t)\rangle=|\psi(t_0)\rangle$.与物理量相对应的可观测量随时间的变化为

$$A_H(t)=U^\dagger(t,t_0)A_sU(t,t_0) \tag{4.59}$$

这里 $A_s$ 是薛定谔图像中的可观测量,而

$$U(t,t_0)=\exp\left[\frac{-\mathrm{i}H_s(t-t_0)}{\hbar}\right] \tag{4.60}$$

算符 $U(t,t_0)$称为演变算符,它是一个公正算符,注意这个算符描述薛定谔图像中的态矢量时间演变.

$$|\psi_s(t)\rangle=U(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle \tag{4.61}$$

## 例 题 解 答

**4.1** 令$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$是物理体系的两个正交归一化态:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle=0,\langle\psi_1|\psi_1\rangle=\langle\psi_2|\psi_2\rangle=1 \tag{4.1.1}$$

$A$ 是体系的可观测量.考虑 $A$ 的非简并本征值记为$\alpha_n$,与之对应的归一化态为$|\phi_n\rangle$,我们定义 $p_1(\alpha_{11})=|\langle\phi_n|\psi_1\rangle|^2$ 和 $P_2(\alpha_n)=|\langle\phi_n|\psi_2\rangle|^2$.(a) 给出 $P_1(\alpha_n)$和 $P_2(\alpha_n)$的物理解释

(b) 一个给定的粒子处于 $3|\psi_1\rangle - 4i|\psi_2\rangle$. 如果测量 $A$, 得到 $\alpha_n$ 的概率是多大?

**解** (a) 根据量子力学假设, $P_1(\alpha_n)$ 是当系统处于态 $|\psi_1\rangle$, $A$ 被测量, 得到 $\alpha_n$ 的概率. 当系统处于 $|\psi_2\rangle$, $P_2(\alpha_n)$ 的含义相同.

(b) 粒子的归一化态是

$$|\psi\rangle = \frac{3|\psi_1\rangle - 4i|\psi_2\rangle}{\sqrt{(3\langle\psi_1| + 4i\langle\psi_2|)(3|\psi_1\rangle - 4i|\psi_2\rangle)}} = \frac{3|\psi_1\rangle - 4i|\psi_2\rangle}{\sqrt{9+16}}$$

$$= \frac{1}{5}(3|\psi_1\rangle - 4i|\psi_2\rangle) \tag{4.1.2}$$

应用量子力学假设(参看理论摘要 4.2 节), 测量到 $\alpha_n$ 的概率是

$$P(\alpha_n) = |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$$

$$\begin{aligned}P(\alpha_n) = |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2 &= \frac{1}{25}|3\langle\phi_n|\psi_1\rangle - 4i\langle\phi_n|\psi_2\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{25}(3\langle\phi_n|\psi_1\rangle - 4i\langle\phi_n|\psi_2\rangle)(3\langle\phi_n|\psi_1\rangle^* + 4i\langle\phi_n|\psi_2\rangle^*) \\ &= \frac{1}{25}[9|\langle\phi_n|\psi_1\rangle|^2 + 16|\langle\phi_n|\psi_2\rangle|^2 + 12i\langle\phi_n|\psi_1\rangle\langle\phi_n|\psi_2\rangle^* \\ &\quad - 12i\langle\phi_n|\psi_2\rangle\langle\phi_n|\psi_1\rangle^*] \\ &= \frac{1}{25}\{9P_1(\alpha_n) + 16P_2(\alpha_n) + 2\mathscr{R}[12i\langle\phi_n|\psi_1\rangle\langle\phi_n|\psi_2\rangle^*]\}\end{aligned} \tag{4.1.3}$$

**4.2** 在理论摘要中介绍的假设Ⅳ推广到连续谱的情况.

**解** 考虑物理可观测量 $A$. 设系统处于归一化态 $|\psi\rangle$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. 令 $|v_\alpha^\beta\rangle$ 为 $A$ 的本征向量构成的态空间中的一组正交归一基.

$$A|v_\alpha^\beta\rangle = \alpha|v_\alpha^\beta\rangle$$

上标 $\beta$ 用以区别对应 $A$ 的同一个简并本征值的不同本征矢量. 这种上标可以是分离的或连续的. 我们假设它是连续的并在区域 $\beta(\alpha)$ 中变化. 因为 $A$ 的谱是连续的, 这意味着获得本征值 $\alpha$ 的概率也是连续的. 另一方面, 我们应当讨论测量结果在 $\alpha$ 和 $\alpha + d\alpha$ 之间的微分概率 $dP(\alpha)$. 模仿离散情况的假设Ⅳ, 于是我们有

$$dP(\alpha) = \left\{\int_{B(\alpha)} |\langle v_\alpha^\beta|\psi\rangle|^2 d\beta\right\} d\alpha \tag{4.2.1}$$

**4.3** 考虑分离谱情况的假设Ⅳ, 证明测得算符 $A$ 的本征值 $\alpha_n$ 的概率的等价形式为

$$P(\alpha_n) = \langle\psi|P_n^\dagger P_n|\psi\rangle \tag{4.3.1}$$

这里 $P_n$ 是到算符 $A$ 的与 $\alpha_n$ 相连的本征子空间的投影

**证** 设 $|u_n^1\rangle$、$|u_n^2\rangle$、…和 $|u_n^{g_n}\rangle$ 形成和 $\alpha_n$ 相连的本征子空间一组正交归一化基, 由定义

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| \tag{4.3.2}$$

于是

$$\begin{aligned}\langle\psi|P_n^\dagger P_n|\psi\rangle &= \sum_{i=1}^{g_n}\sum_{j=1}^{g_n}\langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|u_n^j\rangle\langle u_n^j|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n}\sum_{j=1}^{g_n}\langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^j|\psi\rangle\delta_{ij} \\ &= \sum_{j=1}^{g_n}|\langle u_n^j|\psi\rangle|^2\end{aligned} \tag{4.3.3}$$

因而, 两个公式是等价的.

**4.4** 考虑两个右矢 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$, 且 $|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$, 这里 $\theta$ 是实数.

(a) 证明:如果$|\psi\rangle$是归一化的,$|\psi'\rangle$也是归一化的.(b)证明对任意测量,预言的概率对$|\psi\rangle$和$|\psi'\rangle$是相同的,因此$|\psi\rangle$和$|\psi'\rangle$代表同样的物理态.

**证** (a) 我们假设$|\psi\rangle$是归一化的,或$\langle\psi|\psi\rangle=1$,于是

$$\langle\psi\mid\psi'\rangle=\langle\psi\mid e^{-i\theta}e^{i\theta}\mid\psi\rangle=\langle\psi\mid\psi\rangle=1 \tag{4.4.1}$$

(b) 根据假设Ⅳ(参看理论摘要,第4.2节),对测量预言的概率依赖于形为$|\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$或$|\langle u_n^i|\psi'\rangle|^2$的项.我们有

$$|\langle u_n^i\mid\psi'\rangle|^2=\langle u_n^i\mid\psi'\rangle\langle u_n^i\psi'\rangle^*=e^{i\theta}\langle u_n^i\mid\psi\rangle e^{-i\theta}\langle u_n^i\mid\psi\rangle^*=|\langle u_n^i\mid\psi\rangle|^2 \tag{4.4.2}$$

因而,预言的概率对于态$|\psi\rangle$和$|\psi'\rangle$是相等的.

**4.5** 考虑对系统的一个可观测量进行很多次测量.证明可观测量的平均值表示测量结果的平均.假设算符谱由分离和连续两部分构成,但为简单起见,假设它是非简并的.

**证** 先考虑,属于离散谱部分的本征值$a_n$.从$A$的测量次数$N$(体系处于归一化态$|\psi\rangle$)测得本征$a_n$的次数$N(a_n)$,有关系式

$$\left(\frac{N(a_n)}{N}\right)_{N\to\infty}\to P(a_n) \tag{4.5.1}$$

这里$P(a_n)$是测量获得$a_n$的概率.同样,如果$dN(\alpha)$表示实际结果落在连续谱$\alpha$和$\alpha+d\alpha$之间实验次数,我们有

$$\left(\frac{dN(\alpha)}{N}\right)_{N\to\infty}\to dP(\alpha) \tag{4.5.2}$$

$N$次测量结果的平均是这些值之和除以$N$,因而它等于

$$平均值(N)=\frac{1}{N}\sum_n a_nN(a_n)+\frac{1}{N}\int\alpha dN(\alpha) \tag{4.5.3}$$

当$N\to\infty$,我们得到

$$平均值(N\to\infty)=\sum_n a_nP(a_n)+\int\alpha dP(\alpha) \tag{4.5.4}$$

现在假设$|u_n\rangle$和$|v_\alpha\rangle$一起形成$A$的本征值构成的态空间的一组正交归一化基.这里$n=1,2,\cdots,\alpha$是连续指标

$$A\mid u_n\rangle=a_n\mid u_n\rangle,\qquad A\mid v_\alpha\rangle=\alpha\mid v_\alpha\rangle \tag{4.5.5}$$

这组基的闭合关系是

$$\sum_n\mid u_n\rangle\langle u_n\mid+\int\mid v_\alpha\rangle\langle v_\alpha\mid d\alpha=1 \tag{4.5.6}$$

于是,利用(4.5.4)我们得到

$$\begin{aligned}A_{平均}(N\to\infty)&=\sum_n a_n\mid\langle\psi\mid u_n\rangle\mid^2+\int\alpha\mid\langle\psi\mid v_\alpha\rangle\mid^2d\alpha=\sum_n a_n\langle\psi\mid u_n\rangle\langle u_n\mid\psi\rangle\\&\quad+\int\alpha\langle\psi\mid v_\alpha\rangle\langle v_\alpha\mid\psi\rangle d\alpha\end{aligned} \tag{4.5.7}$$

利用(4.5.5)我们得到

$$\begin{aligned}A_{平均}(N\to\infty)&=\sum_n\langle\psi\mid A\mid u_n\rangle\langle u_n\mid\psi\rangle+\int\langle\psi\mid A\mid v_\alpha\rangle\langle v_\alpha'\mid\psi\rangle d\alpha\\&=\langle\psi\mid A\left[\sum_n\mid u_n\rangle\langle u_n\mid+\int\mid v_\alpha\rangle\langle v_\alpha\mid d\alpha\right]\mid\psi\rangle\end{aligned} \tag{4.5.8}$$

最后,代入闭合关系我们得到

$$A_{平均}(N\to\infty)=\langle\psi\mid A\mid\psi\rangle \tag{4.5.9}$$

**4.6** 考虑算符$A$的方均根差的另一个公式(体系处于归一化态$|\psi\rangle$)

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} \tag{4.6.1}$$

(a) 证明这一定义和 4.9 中给出的等价,(b)应用公式(4.6.1)解释求得方均根差.

**证** (a) 用给出的定义,我们有

$$\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle \tag{4.6.2}$$

注意在这个方程中$\langle A \rangle$—项实际是$\langle A \rangle 1$ 的缩写.这里 1 是全同算符,$\langle A \rangle$是标量,所以

$$\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (A^2 - 2\langle A \rangle A + \langle A \rangle^2) | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - 2\langle A \rangle \langle \psi | A | \psi \rangle + \langle A \rangle^2 \langle \psi | \psi \rangle \tag{4.6.3}$$

利用已知的平均值定义,我们有

$$\langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \tag{4.6.4}$$

于是两个定义是一致的.

(b) 方均根差表示 $A$ 离开其平均值$\langle A \rangle$的偏差的平方的平均值,因而,它刻画了测量结果对平均$\langle A \rangle$的离散程度.例如,如果 $A$ 的谱是连续的,概率具有高斯曲线的形状,$\langle A \rangle$刻画曲线的峰值(最大概率值),而 $\Delta A$ 刻画高斯曲线的宽度.

**4.7** 对于算符 $A$、$B$ 和 $C$,证明下述恒等式成立:

(a) $[B,A] = -[A,B]$

(b) $[A+B,C] = [A,C] + [B,C]$

(c) $[A,BC] = [A,B]C + B[A,C]$

**证** (a) 根据定义

$$[B,A] = BA - AB = -(AB - BA) = -[A,B] \tag{4.7.1}$$

(b) 根据定义

$$\begin{aligned}[A+B,C] &= (A+B)C - C(A+B) = AC + BC - CA - CB \\ &= (AC - CA) + (BC - CB) = [A,C] + [B,C]\end{aligned} \tag{4.7.2}$$

(c) 我们写出

$$[A,BC] = A(BC) - (BC)A = (ABC - BAC) + (BAC - BCA) = [A,B]C + B[A,C] \tag{4.7.3}$$

**4.8** 该算符 $A$ 和 $B$ 与它们的对易括号对易.即,$[B,[A,B]] = [A,[A,B]] = 0$ 证明(a)$[A,B^n] = nB^{n-1}[A,B]$;(b)$[A^n,B] = nA^{n-1}[A,B]$.

**证** (a) 考虑下面步骤:

$$\begin{aligned}[A,B^n] &= AB^n + B^nA = ABB^{n-1} - BAB^{n-1} + B(AB)B^{n-2} - B(BA)B^{n-3} + \cdots + B^{n-1}AB - B^{n-1}BA \\ &= [A,B]B^{n-1} + B[A,B]B^{n-2} + \cdots + B^{n-1}[A,B]\end{aligned} \tag{4.8.1}$$

利用 $B$ 和$[A,B]$对易,我们有

$$[A,B^n] = B^{n-1}[A,B] + B^{n-1}[A,B] + \cdots + B^{n-1}[A,B] = nB^{n-1}[A,B] \tag{4.8.2}$$

(b) 根据问题 4.7(a)$[A^n,B] = -[B,A^n]$,利用上面($a$)的结果,我们得到

$$[A^n,B] = -nA^{n-1}[B,A] = nA^{n-1}[A,B] \tag{4.8.3}$$

**4.9** 考虑问题 4.8 中的算符 $A$ 和 $B$.证明,(a)对每一个解析函数 $F(x)$我们有$[A,F(B)] = [A,B]F'(B)$,这里 $F'(x)$是 $F(x)$的导数.(b)$e^A e^B = e^{A+B} e^{[A,B]/2}$

**证** 首先,我们用归纳法证明,对每一个 $n = 1,2,\cdots$,我们有

$$[A,B^n] = n[A,B]B^{n-1} \tag{4.9.1}$$

证明:对于 $n=1$,方程(4.9.1)显然成立,假设该方程对 $n$ 成立.那么对 $n+1$,利用问题 4.7 的(c),我们有

$$[A,B^{n+1}] = [A,BB^n] = [A,B]B^n + B[A,B^n] = [A,B]B^n + Bn[A,B]B^{n-1} \tag{4.9.2}$$

$B$ 和$[A,B]$对易，于是，最后我们有

$$[A,B^{n+1}]=[A,B]B^n+n[A,B]B^n=(n+1)[A,B]B^n \tag{4.9.3}$$

于是方程(4.9.1)成立. 现在考虑 $F(x)$的幂级数展开，$F(x)=\sum_n a_n x^n$，应用(4.9.1)我们有

$$[A,F(B)]=\left[A,\sum_r a_n B^n\right]=\sum_n a_n[A,B^n]=[A,B]\sum_n na_nB^{n-1} \tag{4.9.4}$$

$F(x)$导数的幂级数展开为 $F'(x)=\sum_n na_nx^{n-1}$，因此，对照上下两式，我们可以得出结论

$$[A,F(B)]=[A,B]F'(B) \tag{4.9.5}$$

(b) 考虑一个算符 $F(s)$依赖于实参数 $s$：

$$F(s)=e^{As}e^{Bs} \tag{4.9.6}$$

$F$ 对 $s$ 的导数是

$$\frac{dF}{ds}=\left(\frac{d}{ds}e^{As}\right)e^{Bs}+e^{As}\left(\frac{d}{ds}e^{Bs}\right)=Ae^{As}e^{Bs}+e^{As}Be^{Bs}$$

$$=Ae^{As}e^{Bs}+e^{As}Be^{-As}e^{As}e^{Bs}=(A+e^{As}Be^{-As})F(s) \tag{4.9.7}$$

利用(a)的结果，我们可以写出

$$[e^{As},B]=-[B,e^{As}]=-s[B,A]e^{As}=s[A,B]e^{As} \tag{4.9.8}$$

所以有 $e^{As}B=Be^{As}+s[A,B]e^{As}$和 $e^{As}Be^{-As}=B+s[A,B]$，代入(4.9.7)，我们得到

$$\frac{dF}{ds}=(A+B+s[A,B])F(s) \tag{4.9.9}$$

因为 $A+B$ 和$[A,B]$对易，我们可以对该微分方程积分，得到

$$F(s)=F(0)e^{A+B+[A,B]s^2/2} \tag{4.9.10}$$

令 $s=0$，我们得到 $F(0)=e^{A\cdot0}e^{B\cdot0}=1\cdot1=1$ 将 $F(0)$和 $s=1$ 代入(4.9.10)，我们得到 $e^Ae^B=e^{A+B}e^{[A,B]/2}$.

**4.10** 令$\langle\psi|$是与右矢$|\psi\rangle$相应的左矢. $|\psi'\rangle$是算符 $A$ 作用于$|\psi\rangle$的结果，于是$|\psi'\rangle=A|\psi\rangle$，令$\langle\psi'|$是$|\psi'\rangle$相应的左矢，证明

$$\langle\psi'|=\langle\psi|A^\dagger \tag{4.10.1}$$

**证** 回忆起左矢作为作用于态空间泛函的基本定义，两个泛函$\langle\psi'|$和$\langle\psi|A^\dagger$ 是相等的，如果它们作用于任意右矢$|\phi\rangle$产生的结果相同；即，我们必须证明

$$\langle\psi'|\phi\rangle=\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle \tag{4.10.2}$$

现在，利用方程(4.13)我们有

$$\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle=\langle\phi|A|\psi\rangle^*=\langle\phi|\psi'\rangle^* \tag{4.10.3}$$

另外，根据标量积的基本性质[参看方程(4.1)]，我们有

$$\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle=\langle\psi'|\phi\rangle \tag{4.10.4}$$

**4.11** 导出伴随算符的如下性质：(a)$(A^\dagger)^\dagger=A$；(b) $(\lambda A)^\dagger=\lambda^*A^\dagger$，这里 $\lambda$ 是复数；(c) $(A+B)^\dagger=A^\dagger+B^\dagger$；(d)$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$.

**解** 首先想到，如果两个算符在态空间一组基下的矩阵元相同，则该两算符恒等. 因此，如果对任意$|\phi\rangle$和$|\psi\rangle$，我们有$\langle\phi|A_1|\psi\rangle=\langle\phi|A_2|\psi\rangle$，那么 $A_1$ 和 $A_2$ 恒等. 在下面的推导过程中，我们还使用到第二章给出复数共轭的一些基本性质.

(a) 应用(4.13)我们有

$$\langle\psi|(A^\dagger)^\dagger|\phi\rangle=\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle^* \tag{4.11.1}$$

再次利用(4.13)，我们有

$$\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle=\langle\psi|A|\phi\rangle^* \tag{4.11.2}$$

因此

$$\langle\psi|(A^\dagger)^\dagger|\phi\rangle=\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle^*=(\langle\psi|A|\phi\rangle^*)^*=\langle\psi|A|\phi\rangle \tag{4.11.3}$$

(b) 我们写出

$$\langle\psi|(\lambda A)^\dagger|\phi\rangle=\langle\phi|\lambda A|\psi\rangle^*=[\lambda\langle\phi|A|\psi\rangle]^*$$

$$=\lambda^*\langle\phi|A|\psi\rangle^*=\lambda^*\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle=\langle\psi|\lambda^*A^\dagger|\phi\rangle \tag{4.11.4}$$

(c) 我们写出

$$\langle\psi|(A+B)^\dagger|\phi\rangle=\langle\phi|(A+B)|\psi\rangle^*=[\langle\phi|A|\psi\rangle+\langle\phi|B|\psi\rangle]^*$$

$$=\langle\phi|A|\psi\rangle^*+\langle\phi|B|\psi\rangle^*=\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle+\langle\psi|B^\dagger|\phi\rangle$$

$$=\langle\psi|(A^\dagger+B^\dagger)|\phi\rangle \tag{4.11.5}$$

(d) 我们定义$|\chi\rangle=B|\psi\rangle$,应用问题4.10的结果,我们有$\langle\chi|=\langle\psi|B^\dagger$.现在

$$\langle\psi|(AB)^\dagger|\phi\rangle=\langle\phi|AB|\psi\rangle^*\equiv\langle\phi|A|\chi\rangle^*=\langle\chi|A^\dagger|\phi\rangle=\langle\psi|B^\dagger A^\dagger|\phi\rangle \tag{4.11.6}$$

**4.12** 考虑一个厄米算符,它有性质$A^3=1$,证明:$A=1$.

**证** 首先我们求出$A$的可能本征值,设$A|\psi\rangle=\alpha|\psi\rangle$,于是我们有

$$|\psi\rangle=A^3|\psi\rangle=A^2(\alpha|\psi\rangle)=\alpha A^2|\psi\rangle=\alpha^2A|\psi\rangle=\alpha^3|\psi\rangle \tag{4.12.1}$$

因而,$\alpha^3=1$.于是$\alpha$的可能值

$$\alpha=-\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{3}}{2}\mathrm{i},\ -\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{3}}{2}\mathrm{i},1 \tag{4.12.2}$$

因为$A$是厄米算态.其本征值是实数;所以$A$的惟一可能本征值是$\alpha=1$.我们可选择$A$的本征值构成的态空间的一组正交归一基,使得$A|u_i\rangle=|u_i\rangle$,于是每一个态$|\phi\rangle$都可以展成

$$|\phi\rangle=\sum_i|u_i\rangle[\text{或}\ |\phi\rangle=\int|u_i\rangle\mathrm{d}s\ \text{如果基具有连续指标}] \tag{4.12.3}$$

最后,

$$A|\phi\rangle=A\sum_i|u_i\rangle=\sum_i A|u_i\rangle=\sum_i|u_i\rangle=1|\phi\rangle \tag{4.12.4}$$

上式意味着$A=1$

**4.13** 证明如果一组分离的正交归一化右矢$\{|u_i\rangle,i=1,2,\cdots\}$构成一组基,于是有

$$\sum_i|u_i\rangle\langle u_i|=1 \tag{4.13.1}$$

**证** 令$|\psi\rangle$为属于态空间的任意右矢.因为$\{|u_i\rangle\}$是基,根据定义,存在惟一展开式$|\psi\rangle=\sum_i C_i|u_i\rangle$,我们利用正交归一化关系(4.16)得到

$$\langle u_j|\psi\rangle=\sum_i C_i\langle u_j|u_i\rangle=\sum_i C_i\delta_{ij}=C_j \tag{4.13.2}$$

于是

$$|\psi\rangle=\sum_i C_i|u_i\rangle=\sum_i\langle u_i|\psi\rangle|u_i\rangle=\Big[\sum_i|u_i\rangle\langle u_i|\Big]|\psi\rangle \tag{4.13.3}$$

注意,这是因为$\langle u_i|\psi\rangle$是一个标量,我们可以改变其在表达式内的位置,我们看到对任何右矢$|\psi\rangle$,作用于它的算符,$P(\{|u_i\rangle\})=\sum_i|u_i\rangle\langle u_i|$也产生同样的右矢$|\psi\rangle$,所以,根据定义,它是恒等算符,$P\{|u_i\rangle\}=1$

**4.14** 证明如果完备性关系对一组连续正交归一右矢$\{|w_\alpha\rangle\}$成立,则这组右矢构成一组基.

**证** 令$|\psi\rangle$是属于态空间的一个任意右矢,利用完备性关系我们有

$$|\psi\rangle=1|\psi\rangle=\int|w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\psi\rangle\mathrm{d}\alpha \tag{4.14.1}$$

定义$C(\alpha):\langle w_\alpha|\psi\rangle$,我们有$|\psi\rangle=\int C(\alpha)|w_\alpha\rangle\mathrm{d}\alpha$.我们看到,任何右矢$|\psi\rangle$都有对$|w_\alpha\rangle$的展开式.

现证明这一展开式是惟一的,我们假设有两个展开式

$$|\psi\rangle = \int C(\alpha)|w_\alpha\rangle d\alpha, \quad |\psi\rangle = \int C'(\alpha)|w_\alpha\rangle d\alpha \tag{4.14.2}$$

两式相减得

$$\int [C(\alpha) - C'(\alpha)]|w_\alpha\rangle d\alpha = 0 \tag{4.14.3}$$

将$\langle w_{\alpha'}|$作用于该右矢,$\int [C(\alpha)-C'(\alpha)]\langle w_{\alpha'}|w_\alpha\rangle d\alpha = 0$并利用正交归一化关系,我们得到

$$\int [C(\alpha) - C'(\alpha)\delta(\alpha' - \alpha)]d\alpha = 0 \tag{4.14.4}$$

方程(4.14.4)仅当$C(\alpha)-C'(\alpha)=0$时成立,因而对任意的$\alpha'$,我们都有$C(\alpha')=C'(\alpha')$,任何右矢$|\psi\rangle$对$\{|w_\alpha\rangle\}$的展开式都是惟一的.

**4.15** 假设对一组确定基$\{|u_i\rangle\}$,算符$A$和$B$分别用矩阵$(A_{ij})$和$(B_{ij})$表示,右矢$|\psi\rangle$用$C_i$表示,左矢$\langle\phi|$用$b_i^*$表示.(a)求算符$AB$的矩阵表示,(b)求右矢$A|\psi\rangle$的表示.(c)求出标量$\langle\phi|A|\psi\rangle$在这些表象中的表达式.

**解** (a) 考虑$AB$的矩阵元

$$(AB)_{ij} = \langle u_i|AB|u_j\rangle = \langle u_i|AB|u_j\rangle \tag{4.15.1}$$

利用完备性关系我们得到

$$(AB)_{ij} = \sum_k \langle u_i|A|u_k\rangle\langle u_k|B|u_j\rangle = \sum_k A_{ik}B_{kj} \tag{4.15.2}$$

(b) 根据定义,右矢$A|\psi\rangle$用数$C_i'=\langle u_i|A|\psi\rangle$表示,在$A$和$|\psi\rangle$之间利用完备性关系,我们有

$$c_i' = \langle u_i|A1|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \sum_j A_{ij}c_j \tag{4.15.3}$$

写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \\ \vdots & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{4.15.4}$$

(c) 我们写出

$$\langle\phi|A|\psi\rangle = \sum_{i,j}\langle\phi|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \sum_{i,j} b_i^* A_{ij}c_j \tag{4.15.5}$$

或以矩阵形式

$$\langle\phi|A|\psi\rangle = (b_1^*\, b_2^* \cdots b_i^* \cdots)\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & & & \\ \vdots & & & & \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{4.15.6}$$

**4.16** 假设$|\phi_n\rangle$,这里$n=1,2,\cdots$,形成物理体系态空间的一组正交归一基.令$A$是矩阵元为$A_{mn}=\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle$的算符,证明$A$可以写成

$$A = \sum_{m,n=1}^{\infty} A_{mn}|\phi_m\rangle\langle\phi_n| \tag{4.16.1}$$

**证** 想到两个算符恒等,当且仅当在某组基上它们的矩阵元相同.因此我们将表达式(4.16.1)的矩阵元写为

$$\langle\phi_k|\left[\sum_{m,n=1}^{\infty} A_{mn}|\phi_m\rangle\langle\phi_n|\right]|\phi_l\rangle = \sum_{m,n=1}^{\infty}\langle\phi_k|\phi_m\rangle\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi_l\rangle$$

$$= \sum_{m,n=1}^{\infty} \delta_{km} \langle \phi_m | A | \phi_n \rangle \delta_{nl} = \langle \phi_k | A | \phi_l \rangle \tag{4.16.2}$$

这里,我们应用了正交归一化关系$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$.

**4.17** 考虑一个两维的物理体系.右矢$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$构成态空间的正交归一基,我们用下式:

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle), \qquad |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) \tag{4.17.1}$$

定义新基$|\phi_1\rangle$和$|\phi_2\rangle$.算符 $P$ 用$|\psi_i\rangle$基表示成矩阵为

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \tag{4.17.2}$$

求出 $P$ 用基$|\phi_i\rangle$的表示.即,求出矩阵 $\tilde{a}_{ij} = \langle \phi_i | P | \phi_j \rangle$.

**解** 法 1 我们定义变换矩阵 $T_{ik} = \langle \psi_i | \varphi_k \rangle$,我们计算其矩阵元,例如

$$T_{11} = \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_1 | (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{4.17.3}$$

和

$$T_{22} = \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_2 | (|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(0-1) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \tag{4.17.4}$$

等,于是我们求出

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.17.5}$$

共轭矩阵是 $T^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$,利用完备性关系 $\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1$ 我们得到

$$\tilde{a}_{kl} = \langle \phi_k | P | \phi_l \rangle = \sum_{i,j=1}^{2} \langle \phi_k | \psi_i \rangle \langle \psi_i | P | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \phi_l \rangle = \sum_{i,j=1}^{2} T^{\dagger}_{ki} a_{ij} T_{jl} \tag{4.17.6}$$

现在我们可以用矩阵形式完成计算

$$(\tilde{a}_{kl}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+\varepsilon & 1-\varepsilon \\ 1+\varepsilon & -1+\varepsilon \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2+2\varepsilon & 0 \\ 0 & 2+2\varepsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+\varepsilon & 0 \\ 0 & 1-\varepsilon \end{pmatrix} \tag{4.17.7}$$

法 2 应看到$|\phi_i\rangle$实际是 $P$ 的本征矢量

$$\begin{pmatrix} 1 & \varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+\varepsilon \\ 1+\varepsilon \end{pmatrix} = (1+\varepsilon) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.17.8}$$

和

$$\begin{pmatrix} 1 & \varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-\varepsilon \\ -1+\varepsilon \end{pmatrix} = (1-\varepsilon) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{4.17.9}$$

因此

$$P|\phi_1\rangle = (1+\varepsilon)|\phi_1\rangle, \quad P|\phi_2\rangle = (1-\varepsilon)|\phi_2\rangle \tag{4.17.10}$$

这意味着:在$|\phi_i\rangle$表象中,$P$ 是对角矩阵.

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} 1+\varepsilon & 0 \\ 0 & 1-\varepsilon \end{pmatrix} \tag{4.17.11}$$

**4.18** 参考问题 4.17 并求出右矢 $e^{P}|\psi_1\rangle$用$|\psi_i\rangle$基的表示.

**解** 因为 $P$ 用 $|\phi_i\rangle$ 基表示是对角矩阵，用 $|\phi_i\rangle$ 基运算是容易的. 所以

$$e^P|\phi_1\rangle = e^{1+\epsilon}|\phi_1\rangle,\quad e^P|\phi_2\rangle = e^{1-\epsilon}|\phi_2\rangle \tag{4.18.1}$$

于是我们有

$$e^P|\psi_1\rangle = e^P\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle\right) = \frac{1}{2}[e^{1+\epsilon}|\psi_1\rangle + e^{1-\epsilon}|\psi_2\rangle + e^{1-\epsilon}|\psi_1\rangle - e^{1-\epsilon}|\psi_2\rangle]$$

$$= \frac{1}{2}[(e^{1+\epsilon}+e^{1-\epsilon})|\psi_1\rangle + (e^{1+\epsilon}-e^{1-\epsilon})|\psi_2\rangle] \tag{4.18.2}$$

因此，$e^P|\psi_1\rangle$ 用 $|\psi_i\rangle$ 基表示为

$$e^P|\psi_1\rangle - \frac{e}{2}\begin{pmatrix} e^{\epsilon}+e^{-\epsilon} \\ e^{\epsilon}-e^{-\epsilon}\end{pmatrix} \tag{4.18.3}$$

**4.19** (a)证明右矢 $|\boldsymbol{r}\rangle$[这里 $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$]是可观测量 $X$ 的属于本征值 $x$ 的本征矢量. (b)证明 $|\boldsymbol{p}\rangle$[这里 $\boldsymbol{p}=(p_x,p_y,p_z)$]是 $P_x$ 的属于本征值 $P_x$ 的本征矢量.

**证** (a) 利用 $r$ 表象，我们有 $\langle\boldsymbol{r}'|X|\boldsymbol{r}\rangle = x'\langle\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{r}\rangle$. 代入 $\langle\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{r}\rangle$ 的表达式，我们得到

$$\langle\boldsymbol{r}'|X|\boldsymbol{r}\rangle = x'\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}) = x\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}). \tag{4.19.1}$$

这里 $\boldsymbol{r}'=(x',y',z')$. 因此，我们有 $\langle\boldsymbol{r}'|X|\boldsymbol{r}\rangle = x\langle\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{r}\rangle$，因为此式对所有的 $\boldsymbol{r}'$ 均成立，所以我们有

$$X|\boldsymbol{r}\rangle = x|\boldsymbol{r}\rangle \tag{4.19.2}$$

(b) 在 $p$ 表象中，我们应用和(a)同样的方法，于是

$$\langle\boldsymbol{p}'|P|\boldsymbol{p}\rangle = p_x'\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}\rangle = p_x'\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}) = p_x\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}) = p_x\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}\rangle \tag{4.19.3}$$

因此，$P|\boldsymbol{p}\rangle = p_x|\boldsymbol{p}\rangle$. 结论，因为相似的讨论可以用于 $y$ 和 $z$ 分量，所以可以写出

$$\begin{cases} X|\boldsymbol{r}\rangle = x|\boldsymbol{r}\rangle \\ Y|\boldsymbol{r}\rangle = y|\boldsymbol{r}\rangle, \\ Z|\boldsymbol{r}\rangle = z|\boldsymbol{r}\rangle \end{cases}\qquad \begin{cases} P_x|\boldsymbol{r}\rangle = p_x|\boldsymbol{r}\rangle \\ P_y|\boldsymbol{r}\rangle = p_y|\boldsymbol{r}\rangle \\ P_z|\boldsymbol{r}\rangle = p_z|\boldsymbol{r}\rangle \end{cases} \tag{4.19.4}$$

**4.20** (a)证明 $\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\nabla\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle$，(b)用 $|\phi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 相应的波函数写出 $\langle\phi|P_x|\psi\rangle$ 的表达式.

**证** (a) 例如，考虑 $x$ 分量($y$ 和 $z$ 分量可以用完全相同的办法处理)，我们有

$$\langle\boldsymbol{r}|P_x|\psi\rangle = \int\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|p_x|\psi\rangle d^3p \tag{4.20.1}$$

这里，我们使用了 $p$ 表象的完备性关系，应用理论摘要中的方程(4.41)和(4.47)我们得到

$$\langle\boldsymbol{r}|P_x|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}p_x\bar{\psi}(\boldsymbol{p})d^3p \tag{4.20.2}$$

这一表达式是 $p_x\bar{\psi}(\boldsymbol{p})$ 的傅里叶变换，等于 $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial x}$，因而我们有

$$\langle\boldsymbol{r}|p_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{r}) \tag{4.20.3}$$

(b) 设 $\phi(\boldsymbol{r})$ 和 $\psi(\boldsymbol{r})$ 分别是 $|\phi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 相应的波函数；于是

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\phi\rangle,\ \psi(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle \tag{4.20.4}$$

利用 $r$ 表象的完备性关系和($a$)的结果，我们得到

$$\langle\phi|p_x|\psi\rangle = \int\langle\phi|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|p_x|\psi\rangle d^3r = \int\phi^*(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial x}d^3r \tag{4.20.5}$$

**4.21** 证明(a)$[x,y]=0$；(b)$[p_x,p_y]=0$；(c)$[x,p_x]=i\hbar$；(d) $[x,p_y]=0$.

**证** (a) 利用 $r$ 表象，我们 $[x,y]$ 作用到任何右矢 $|\psi\rangle$

$$\langle \boldsymbol{r} \mid [x,y] \mid \psi\rangle = \langle \boldsymbol{r} \mid xy \mid \psi\rangle - \langle \boldsymbol{r} \mid yx \mid \psi\rangle \tag{4.21.1}$$

应用理论摘要中的方程(4.46)(4.2节)，$\langle \boldsymbol{r}|[x,y]|\psi\rangle = x\langle \boldsymbol{r}|y|\psi\rangle - y\langle \boldsymbol{r}|x|\psi\rangle$. 于是

$$\langle \boldsymbol{r} \mid x,y \mid \psi\rangle = xy\langle \boldsymbol{r} \mid \psi\rangle - yx\langle \boldsymbol{r} \mid \psi\rangle = 0 \tag{4.21.2}$$

因为上式对任何$\langle \boldsymbol{r}|$和任意$|\psi\rangle$都是成立的，所以有$[x,y]=0$

(b) 我们在 $p$ 表象中应用同样的方法

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{p} \mid [p_x,p_y] \mid \psi\rangle &= \langle \boldsymbol{p} \mid p_xp_y \mid \psi\rangle - \langle \boldsymbol{p} \mid p_yp_x \mid \psi\rangle \\ &= p_x\langle \boldsymbol{p} \mid p_y \mid \psi\rangle - p_y\langle \boldsymbol{p} \mid p_x \mid \psi\rangle = p_xp_y\langle \boldsymbol{p} \mid \psi\rangle \\ &\quad - p_yp_x\langle \boldsymbol{p} \mid \psi\rangle = 0\end{aligned} \tag{4.21.3}$$

(c) 我们写出

$$\langle \boldsymbol{r} \mid [x,p_x] \mid \psi\rangle = \langle \boldsymbol{r} \mid xp_x \mid \psi\rangle - \langle \boldsymbol{r} \mid p_xx \mid \psi\rangle$$

所以

$$\langle \boldsymbol{r} \mid [x,p_x] \mid \psi\rangle = x\langle \boldsymbol{r} \mid p_x \mid \psi\rangle - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\langle \boldsymbol{r} \mid x \mid \psi\rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}x\frac{\partial}{\partial x}\langle \boldsymbol{r} \mid \psi = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\rangle(x\langle \boldsymbol{r} \mid \psi\rangle) \tag{4.21.4}$$

如果 $\psi(\boldsymbol{r})$是相应于$|\psi\rangle$的波函数，我们有

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r} \mid [x,p_x] \mid \psi\rangle &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[x\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial x} - \frac{\partial(x\psi(\boldsymbol{r}))}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[x\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial x} - \psi(\boldsymbol{r}) - x\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial x}\right] \\ &= \mathrm{i}\hbar\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{i}\hbar\langle \boldsymbol{r} \mid \psi\rangle\end{aligned} \tag{4.21.5}$$

因为计算对所有的$|\psi\rangle$和任何 $\boldsymbol{r}\rangle$都是成立的，所以得到$[x,p_x]=i\hbar$

(d) 再次使用(c)中的方法，我们得到

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r} \mid [x,p_y] \mid \psi\rangle &= x\langle \boldsymbol{r} \mid p_y \mid \psi\rangle - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y}\langle \boldsymbol{r} \mid x \mid \psi\rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}x\frac{\partial}{\partial y}\psi(\boldsymbol{r}) - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial y}(x\psi(\boldsymbol{r})) \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[x\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial y} - x\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial y}\right] = 0\end{aligned} \tag{4.21.6}$$

**4.22** 考虑如下算符：

$$O_1\psi(x) = x^3\psi(x), \quad O_2\psi(x) = x\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \tag{4.22.1}$$

求对易关系$[O_1,O_2]$.

**解** 法 1 将算符 $O_1$ 和 $O_2$ 代入对易关系中，我们得到

$$\begin{aligned}[O_1,O_2]\psi &= O_1(O_2\psi(x)) - O_2(O_1\psi(x)) = x^3\left[x\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right] - x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}[x^3\psi(x)] \\ &= x^4\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - x\left[3x^2\psi(x) + x^3\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right] = -3x^3\psi(x)\end{aligned} \tag{4.22.2}$$

法 2 根据 $x$ 和 $p$ 在 $x$ 表象中的作用，我们有 $O_1=x^3$ 和 $O_2=\mathrm{i}xp/\hbar$，因而$[O_1,O_2]=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[x^3,xp]$，应用问题 4.2(b)的结果，我们有

$$[O_1,O_2] = \frac{3\mathrm{i}}{\hbar}x^2[x,xp] = \frac{3\mathrm{i}}{\hbar}x^2([x,x]p + x[x,p]) = -3x^3 \tag{4.22.3}$$

$$[O_1,O_2]\psi(x) = -3x^3\psi(x) \tag{4.22.4}$$

**4.23** 角动量定义为 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$(例如，$L_x=yp_z-zp_y$). 应用 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的对易关系以及问题 4.7 中导出的对易括号的性质，求如下的对易关系：

(a)$[L_x,L_y]$；(b)$[L_y^2,L_x]$和$[L_z^2,L_x]$； (c) $[L^2,L_x]$.

**解** (a) 根据定义

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \tag{4.23.1}$$

这里，我们使用了 $yp_z$ 和 $xp_z$ 对易，$zp_y$ 和 $zp_x$ 对易的事实．利用问题 4.1，(c)中导出的关系，我们有

$$y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y = -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y = i\hbar L_z \tag{4.23.2}$$

(b) 我们写出

$$[L_y^2, L_x] = L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y = -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y \tag{4.23.3}$$

同样

$$[L_z^2, L_x] = L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z = i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z \tag{4.23.4}$$

我们写出

$$\begin{aligned}[L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= 0 - i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z = 0\end{aligned} \tag{4.23.5}$$

该结果对$(L^2, L_y)$和$(L^2, L_z)$也是正确的．

**4.24**　一个粒子用波函数

$$\psi(x) = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{-1/4} e^{-ax^2/2} \tag{4.24.1}$$

描述，计算 $\Delta x$ 和 $\Delta p$，并验证测不准关系．

**解**　我们从考虑 $x$ 的矩阵元开始

$$\langle x\rangle = \langle\psi | x | \psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-ax^2}dx = 0 \tag{4.24.2}$$

这里我们使用了 $xe^{-ax^2}$ 是奇函数的事实．还有

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2\,|\psi(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}dx = 2\sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2}dx \\ &= 2\sqrt{\frac{a}{\pi}}\,\frac{\Gamma(1/2)}{2a^{3/2}} = \frac{1}{2a}\end{aligned} \tag{4.24.3}$$

于是

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{2a}} \tag{4.24.4}$$

为求出 $\Delta p$，我们计算动量表象中的波函数

$$\begin{aligned}\bar\psi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}\psi(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{\pi}{a}\right)^{-1/4}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}e^{-ax^2/2}dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{\pi}{a}\right)^{-1/4}\sqrt{\frac{2\pi}{a}}e^{-p^2/2a\hbar^2} = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\left(\frac{1}{\pi a}\right)^{1/4} e^{-p^2/2a\hbar^2}\end{aligned} \tag{4.24.5}$$

因为 $\bar\psi(p)$是偶函数，我们得到$\langle p\rangle = 0$ 和

$$\langle p^2\rangle = \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{\pi a}}\int_{-\infty}^{\infty} p^2 e^{-p^2/a\hbar^2}dp = \frac{2}{\hbar\sqrt{a\pi}}\int_0^{\infty} p^2 e^{-p^2/a\hbar^2}dp = \frac{2}{\hbar\sqrt{\pi a}}\frac{\sqrt{\pi}/2}{2(1/a\hbar^2)^{3/2}} = \frac{a\hbar^2}{2} \tag{4.24.6}$$

于是我们有

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \sqrt{\frac{a}{2}}\hbar \tag{4.24.7}$$

最后，测不准关系将是 $\Delta x\Delta p = \hbar/2$．

这一例子表明测不准关系的基本性质．如果我们选择围绕中心位置$\langle x\rangle$更小离散度的波函数，我们将得到动量围绕$\langle p\rangle$的更大离散度．

**4.25**　粒子处于态$|\psi\rangle$．其波函数是 $\psi(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle$．(a) 求算符 $A = |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|$ 的平均值；(b) 计

算$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}|\psi\rangle$;(c)求算符 $k_r=[|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|]/2m$ 的平均值,这里 $\boldsymbol{p}$ 是动量算符而 $m$ 是粒子质量.

**解** (a) 根据定义

$$\langle A\rangle=\langle\psi|A|\psi\rangle=\langle\psi|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle=\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})=|\psi(\boldsymbol{r})|^2 \tag{4.25.1}$$

(b) $\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}|\psi\rangle$的 $x$ 分量等于

$$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}|\psi\rangle_x=\langle\boldsymbol{r}|p_x|\psi\rangle=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r})}{\partial x} \tag{4.25.2}$$

因此,$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}|\psi\rangle_x=\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\psi(\boldsymbol{r})\right]_x$.对 $y$ 和 $z$ 有相似的结果,于是,我们有$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}|\psi\rangle=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\psi$

(c)根据定义,

$$\begin{aligned}\langle\psi|k_r|\psi\rangle&=\frac{1}{2m}[\langle\psi|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}|\psi\rangle+\langle\psi|\boldsymbol{p}|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle]\\&=\frac{2}{m}\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\psi(\boldsymbol{r})+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\right]\\&=\frac{1}{m}\mathrm{Im}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\psi\right)\right]\end{aligned} \tag{4.25.3}$$

**4.26** 宇称算符 $\pi$ 用

$$\pi|\boldsymbol{r}\rangle=|-\boldsymbol{r}\rangle \tag{4.26.1}$$

定义。(a)令$|\psi\rangle$为任意右矢,其相应波函数为 $\psi(\boldsymbol{r})$.求相应于 $\pi|\psi\rangle$的波函数;(b) 证明 $\pi$ 是厄米算符;(c)求算符 $\pi^2$、$\pi$ 的可能本征值是什么?(d) 我们定义算符

$$p_+=\frac{1}{2}(1+\pi),\qquad p_-=\frac{1}{2}(1-\pi) \tag{4.26.2}$$

对任意右矢$|\psi\rangle$,我们还定义

$$|\psi_+\rangle=p_+|\psi\rangle,\quad|\psi_-\rangle=p_-|\psi\rangle \tag{4.26.3}$$

证明$|\psi_+\rangle$和$|\psi_-\rangle$是 $\pi$ 的本征矢量;(e)证明$|\psi_+\rangle$和$|\psi_-\rangle$相应的波函数分别是偶函数和奇函数.

**证** (a) 开始,我们考虑右矢$|\psi\rangle=\int\psi(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}\rangle\mathrm{d}^3r$　于是

$$\pi\ \psi\rangle=\int\psi(\boldsymbol{r})[\pi|\boldsymbol{r}\rangle]\mathrm{d}^3r=\int\psi(\boldsymbol{r})|-\boldsymbol{r}\rangle\mathrm{d}^3r \tag{4.26.4}$$

作积分变数替换 $\boldsymbol{r}'=-\boldsymbol{r}$,和$\pi|\psi\rangle$相应的波函数是

$$\langle\boldsymbol{r}|\pi|\psi\rangle=\int\psi(-\boldsymbol{r}')\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle\mathrm{d}^3r'=\int\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'=\psi(-\boldsymbol{r}) \tag{4.26.5}$$

(b) 利用(a)的结果,我们有$\langle\boldsymbol{r}|\pi|\psi\rangle=\langle-\boldsymbol{r}|\psi\rangle$,因而,$\langle\boldsymbol{r}|\pi=\langle-\boldsymbol{r}|$.另一方面,取(4.26.1)的厄米共轭得到$\langle\boldsymbol{r}|\pi^+=\langle-\boldsymbol{r}|$.因为上式对任何$\langle\boldsymbol{r}|$都是成立的,遂有 $\pi=\pi^+$.

(c) 我们有

$$\pi^2|\boldsymbol{r}\rangle=\pi\pi|\boldsymbol{r}\rangle=\pi|-\boldsymbol{r}\rangle=|\boldsymbol{r}\rangle \tag{4.26.6}$$

因为上式对任何$|\boldsymbol{r}\rangle$都成立,我们有 $\pi^2=1$,设$|\phi\rangle$是 $\pi$ 的具有本征值 $p$ 的本征矢量,$\pi|\phi\rangle=p|\phi\rangle$,于是,一方面我们有

$$\pi^2|\phi\rangle=1|\phi\rangle=|\phi\rangle \tag{4.26.7}$$

而另一方面我们有

$$\pi^2|\phi\rangle=\pi(p|\phi\rangle)=p\pi|\phi\rangle=p^2|\phi\rangle \tag{4.26.8}$$

因此 $p^2=1$,但是,因为 $\pi$ 是厄米算符,其本征值必须是实数,所以可能的本征值是 +1 和 -1

(d) 我们有

$$\pi|\psi_+\rangle = \pi p_+|\psi\rangle = \frac{1}{2}\pi(1+\pi)|\psi\rangle = \frac{1}{2}(\pi+\pi^2)|\psi\rangle \tag{4.26.9}$$

使用(c)的结果,我们得到

$$\pi|\psi_+\rangle = \frac{1}{2}(\pi+1)|\psi\rangle = p_+|\psi\rangle = |\psi_+\rangle \tag{4.26.10}$$

所以 $|\psi_+\rangle$ 是 $\pi$ 的本征值为 +1 的本征矢量. 同样,我们可以得到结论 $|\psi_-\rangle$ 是 $\pi$ 的本征值为 -1 的本征矢量.

(e) 利用(a)的结果,我们有 $\langle \boldsymbol{r}|\pi|\psi_+\rangle = \psi_+(-\boldsymbol{r})$. 另一方面,根据(d)的结果

$$\langle \boldsymbol{r}|\pi|\psi_+\rangle = \langle \boldsymbol{r}|\psi_+\rangle = \psi_+(\boldsymbol{r}) \tag{4.26.11}$$

因此, $\psi_+(-\boldsymbol{r}) = \psi_+(\boldsymbol{r})$, 故 $\psi_+$ 是偶函数,同样 $\langle \boldsymbol{r}|\pi|\psi_-\rangle = \psi_-(-\boldsymbol{r})$,以及

$$\langle \boldsymbol{r}|\pi|\psi_-\rangle = -\langle \boldsymbol{r}|\psi_-\rangle = \psi_-(-\boldsymbol{r}) \tag{4.26.12}$$

因而, $\psi_-(\boldsymbol{r}) = -\psi_-(-\boldsymbol{r})$,且 $\psi_-$ 是奇函数. 注意,对任何右矢 $|\psi\rangle$ 我们可以将其写成 $|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle$. 这样,我们就得到一个方法将波函数分成偶函数和奇函数两部分.

**4.27** 考虑用哈密顿量

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{4.27.1}$$

描述的一维物理体系. (a)证明 $[H,x] = -\mathrm{i}\hbar p/m$; (b)对定态,求 $\langle p\rangle$(仅考虑平方可积态).

**证明** (a)考虑对易关系

$$[H,x] = \frac{1}{2m}[p^2,x] + [V(x),x] = \frac{1}{2m}2p[p,x] + 0 = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m^p} \tag{4.27.2}$$

(b)在定态,我们有 $H|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$,这里 $\lambda$ 是本征值,因为 $H$ 是厄米算符,我们还有 $\langle\psi|H = \lambda|\psi\rangle$. 利用(a)的结果,我们最后得到

$$\langle p\rangle = \langle\psi|p|\psi\rangle = \frac{\mathrm{i}m}{\hbar}\langle\psi|Hx - xH|\psi\rangle = \frac{\mathrm{i}m}{\hbar}[\lambda\langle\psi|x|\psi\rangle - \lambda\langle\psi|x|\psi\rangle] = 0 \tag{4.27.3}$$

**4.28** 考虑一维自由粒子, $t=0$ 时刻的波函数由

$$\psi(x,0) = N\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-|k|/k_0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{4.28.1}$$

给出,这里 $N$ 是归一化常数,而 $k_0$ 是实数. 在时刻 $t$ 作动量测量,求测量结果落在 $-p_1$ 和 $p_1$ 之间的概率 $p\langle p,t\rangle$.

**解答** 首先我们注意到粒子的波函数 $\psi(x,t)$ 和其在动量表象中的波函数 $\tilde{\psi}(p,t)$ 之间的关系是

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\tilde{\psi}(p,t)\mathrm{d}p \tag{4.28.2}$$

(这是傅里叶变换),将 $k = p/\hbar$ 代入 $\psi(x,0)$,我们得到

$$\psi(x,0) = \frac{N}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-|p|/\hbar k_0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{4.28.3}$$

因而

$$\tilde{\psi}(p,0) = \frac{N}{\hbar}\sqrt{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{-|p|/\hbar k_0} \tag{4.28.4}$$

从 $\overline{\psi}(p,0)$的归一化条件,我们可以求出常数 $N$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}(p,0)|^2 \mathrm{d}p = \frac{2\pi N^2}{\hbar}\int_{\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2p/\hbar k_0}\mathrm{d}p = \frac{2\pi N^2}{\hbar}\left[2\left(-\frac{\hbar k_0}{2}\right)\mathrm{e}^{2p/\hbar k_0}\Big|_0^{\infty}\right] = 2\pi k_0 N^2 = 1 \tag{4.28.5}$$

因此 $N=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi k_0}}$,并且

$$\tilde{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{\hbar k_0}}\mathrm{e}^{-2|p|/\hbar k_0} \tag{4.28.6}$$

自由粒子的哈密顿量是 $H=p^2/2m$.态空间的基$|p\rangle$由 $H$ 的本征矢量构成.

$$H|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle = E_p|p\rangle \tag{4.28.7}$$

注意,对任何 $\overline{p}.\overline{\psi}(\overline{p},t)$实际是粒子的态$|\psi(t)\rangle$,基$|p\rangle$的展开式中$|\overline{p}\rangle$的系数:

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\psi}(p,t)|p\rangle\mathrm{d}p \tag{4.28.8}$$

这里 $\overline{\psi}(p,t)=\langle p|\psi\rangle$. $|\psi(t)\rangle$的时间演变可表示为

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(p,0)\mathrm{e}^{E_p t/\hbar}|p\rangle\mathrm{d}p = \frac{1}{\sqrt{\hbar k_0}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-p t/\hbar k_0}\mathrm{e}^{-p^2/t2m\hbar}|p\rangle\mathrm{d}p \tag{4.28.9}$$

或等价于

$$\tilde{\psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar k_0}}\mathrm{e}^{-|p|/\hbar k_0}\mathrm{e}^{-p^2 t/2m\hbar} \tag{4.28.10}$$

最后,我们得到

$$P(p_1,t) = \int_{-p_1}^{p_1}|\tilde{\psi}(p,t)|^2\mathrm{d}p = \frac{1}{\hbar k_0}\int_{-p_1}^{p_1}\exp\left[2\left(\frac{p^2}{2m\hbar}t - \frac{|p|}{\hbar k_0}\right)\right]\mathrm{d}p = \frac{2}{\hbar k_0}\int_0^{p_1}\exp\left(\frac{tp^2}{m\hbar} - \frac{2p}{\hbar k_0}\right)\mathrm{d}p \tag{4.28.11}$$

**4.29** 考虑用动力学变量 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 表示的经典量 $f$,就是 $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$,假设在 $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$出现形为 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 的项,用量子化规则,求出与此项对应的量子力学算符.

**解** 令算符 $\boldsymbol{R}$ 相应于经典坐标 $\boldsymbol{r}$,算符 $\boldsymbol{P}$ 相应于经典动量 $\boldsymbol{p}$,注意 $\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}$ 不是厄米算符

$$(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P})^{\dagger} = (XP_x + YP_y + ZP_z)^{\dagger} = P_xX + P_yY + P_zZ = \boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R} \tag{4.29.1}$$

为了求出与 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 相应厄米算符,我们必须将算符 $\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}$ 对称化

$$\frac{1}{2}[\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}+(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P})^{\dagger}] = \frac{1}{2}(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}+\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}) \tag{4.29.2}$$

作为练习,请证明该算符的确是厄米算符.

**4.30** 考虑一个具有三维态空间的物理体系.在态空间选定一组正交归一基,在这组基下,哈密顿量可用矩阵

$$H = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{4.30.1}$$

表示.(a)当测量系统的能量时,可能的结果是什么?(b)一个粒子处于$|\psi\rangle$,用这组基表示为$\dfrac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} \end{pmatrix}$,求$\langle H\rangle$、$\langle H^2\rangle$和 $\Delta H$.

**解** (a)可能的能量是 $H$ 的本征值.它可以通过解方程 $\det(H-\lambda)=0$ 求出.或

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & 2-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 3-\lambda \end{vmatrix} = [(2-\lambda)^2 - 1](3-\lambda) = (\lambda^2 - 4\lambda + 3)(3-\lambda)$$

$$= (3-\lambda)^2(1-\lambda) \tag{4.30.2}$$

因此有，$E_1=1$ 和 $E_2=3$，注意 $E_1$ 是非简单本征值，而 $E_2$ 是简并的，它对应一个两维的子空间

(b) 法 1　我们写出

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{3}}(-\mathrm{i}\quad \mathrm{i}\quad -\mathrm{i})\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} = \frac{1}{3}(-\mathrm{i}\quad \mathrm{i}\quad -\mathrm{i})\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ 3\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{3}(1+1+3) = \frac{5}{3} \tag{4.30.3}$$

以及

$$\langle H^2\rangle = \langle\psi|H^2|\psi\rangle = \frac{1}{3}(-\mathrm{i}\quad \mathrm{i}\quad -\mathrm{i})\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}^2\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} \tag{4.30.4}$$

$$= \frac{1}{3}(-\mathrm{i}\quad \mathrm{i}\quad -\mathrm{i})\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ 3\mathrm{i} \end{pmatrix} = \frac{1}{3}(-\mathrm{i}\quad \mathrm{i}\quad -\mathrm{i})\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ 9\mathrm{i} \end{pmatrix} = \frac{1}{3}(1+1+9) = \frac{11}{3}$$

和

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2} = \sqrt{\frac{11}{3} - \frac{25}{9}} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \tag{4.30.5}$$

法 2　我们定义

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |u_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} \tag{4.30.6}$$

于是 $|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|u_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|u_2\rangle$，注意 $|u_1\rangle$ 和 $|u_2\rangle$ 都是 $H$ 的本征矢量

$$H|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} \\ 0 \end{pmatrix} = |u_1\rangle = E_1|u_1\rangle \tag{4.30.7}$$

同样，$H|u_2\rangle = 3|u_2\rangle = E_2|u_2\rangle$，本征向量 $|u_1\rangle$ 和 $|u_2\rangle$ 是正交的，这是因为它们对应 $H$ 的不同本征值. 于是我们得到

$$\langle H\rangle = \left(\sqrt{\frac{2}{3}}\langle u_1| + \sqrt{\frac{1}{3}}\langle u_2|\right)H\left(\sqrt{\frac{2}{3}}|u_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|u_2\rangle\right) = \frac{2}{3}E_1\langle u_1|u_1\rangle$$

$$+ \frac{2}{3}E_2\langle u_2|u_2\rangle = \frac{2}{3} + 1 = \frac{5}{3} \tag{4.30.8}$$

另外

$$\langle H^2\rangle = \langle\psi|H^2|\psi\rangle = \left(\sqrt{\frac{2}{3}}\langle u_1| + \sqrt{\frac{1}{3}}\langle u_2|\right)H\left(\sqrt{\frac{2}{3}}E_1|u_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}E_2|u_2\rangle\right)$$

$$= \frac{2}{3}E_1^2 + \frac{1}{3}E_2^2 = \frac{11}{3} \tag{4.30.9}$$

和

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2} = 2\sqrt{2}/3$$

**4.31** 参考问题 4.30. 假设体系的能量被测量，测得 $E=1$. 随后对变量 $A$ 进行测量. 变量 $A$ 在同一组基下同矩阵

$$A=\begin{pmatrix}5 & 0 & 0\\ 0 & 2 & \mathrm{i}\\ 0 & -\mathrm{i} & 2\end{pmatrix} \tag{4.31.1}$$

描述，(a)求 $A$ 的可能结果；(b)获得(a)中每一个结果的概率是多大？

**解** (a)可能的结果是 $A$ 的本征值，可通过解如下的久期方程求出：

$$\det(A-\lambda)=(5-\lambda)[(2-\lambda)^2-1]=(5-\lambda)(3-\lambda)(1-\lambda) \tag{4.31.2}$$

因此

$$a_1=1,\qquad a_2=3,\qquad a_3=5 \tag{4.31.3}$$

(b) 能量 $E=1$ 是哈密顿量的非简并本征值，于是测量能量后，系统的态仍被本征矢量

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\\ 0\end{pmatrix} \tag{4.31.4}$$

很好地确定. 现在，我们求 $A$ 的属于(a)中每个本征值的本征矢量. 完成这件事情，只要直接解方程

$$\begin{pmatrix}5 & 0 & 0\\ 0 & 2 & \mathrm{i}\\ 0 & -\mathrm{i} & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{pmatrix}=a_j\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{pmatrix} \tag{4.31.5}$$

例如，对 $a_1$，我们有

$$\begin{cases}5\alpha=\alpha\\ 2\beta+\mathrm{i}\gamma=\beta\\ -\mathrm{i}\beta+2\gamma=\gamma\end{cases} \tag{4.31.6}$$

因此，$\alpha=0$，任意选择 $\beta=1$，我们得到 $\gamma=\mathrm{i}$，于归一化后，我们得到

$$\xi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\ 1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix} \tag{4.31.7}$$

以同样的方式，我们可以得到 $A$ 的属于 $a_2$ 和 $a_3$ 的本征矢量

$$\xi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\ \mathrm{i}\\ 1\end{pmatrix},\qquad \xi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix} \tag{4.31.8}$$

最后，测量得到结果 $a_x$ 的概率是 $p(a_j)=|\langle\xi_j|\psi\rangle|^2$，于是

$$P(a_1)=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(0\quad 1\quad -\mathrm{i})\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\\ 0\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{4}|-1|^2=\frac{1}{4} \tag{4.31.9}$$

同样，我们有

$$P(a_2)=\frac{1}{4}\left|(0\quad \mathrm{i}\quad 1)\begin{pmatrix}1\\ -1\\ 0\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{4} \tag{4.31.10}$$

和

$$P(a_3)=\frac{1}{2}\left|(1\quad 0\quad 0)\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{2} \tag{4.31.11}$$

**4.32** 质量为 $m$ 的粒子被限制在位于 $x=0$ 和 $x=L$ 的一维无限深势阱中，粒子的定态 $|\phi_n\rangle$ 相应于能量

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2 h^2}{2mL^2},\quad n=1,2,\cdots \tag{4.32.1}$$

和波函数 $\phi_n=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right)$，考虑这种情况：在时刻 $t=0$，粒子处于态 $|\psi(0)\rangle=[|\phi_1\rangle+|\phi_2\rangle]/\sqrt{2}$. (a)求含时的 $|\psi(t)\rangle$；(b)计算波函数 $\psi(x,t)$

**解** (a) 因为 $E_1=\pi^2\hbar^2/2mL^2$，$E_2=2\pi^2\hbar^2/mL^2$，我们有

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}|\phi_1\rangle+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}|\phi_2\rangle]=\frac{1}{\sqrt{2}}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi^2\hbar t/2mL^2}|\phi_1\rangle+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\pi^2\hbar t/2mL^2}|\phi_2\rangle] \tag{4.32.2}$$

(b) 波函数 $\psi(x,t)$ 可由计算 $\langle x|\psi(t)\rangle$ 得到，即

$$\begin{aligned}\psi(x,t)=\langle x|\psi(t)\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle x|\phi_1\rangle\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\pi^2\hbar}{2mL^2}t\right)+\langle x|\phi_2\rangle\exp\left(\frac{\mathrm{i}\pi^2\hbar}{mL^2}t\right)\right]\\&=\frac{1}{\sqrt{L}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\pi^2\hbar t}{2mL^2}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)+\frac{1}{\sqrt{L}}\exp\left(-\frac{2\mathrm{i}\pi^2\hbar t}{mL^2}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\end{aligned} \tag{4.32.3}$$

**4.33** 证明从薛定谔方程求出的态矢量的模保持常量.

**证** 考虑薛定谔方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle \tag{4.33.1}$$

在方程(4.33.1)两边取厄米共轭，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|H^\dagger(t)=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|H(t) \tag{4.33.2}$$

因 $H(t)$ 是可观测量，所以它必须是厄米算符，于是我们有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle&=\frac{\mathrm{d}\langle\psi(t)|}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle+\langle\psi(t)|\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}\\&=\left[-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi(t)|H(t)\right]|\psi(t)\rangle\\&\quad+\langle\psi(t)|\left[\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle\right]=0\end{aligned} \tag{4.33.3}$$

**4.34** 势 $V(\boldsymbol{r})$ 中的粒子，其哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2m}\boldsymbol{P}^2+V(\boldsymbol{R}) \tag{4.34.1}$$

(a) 在 $r$ 表象中写出薛定谔方程；(b)在 $p$ 表象中写出薛定谔方程.

**解** 考虑薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle=H|\psi(t)\rangle \tag{4.34.2}$$

将该方程投影到 $r$ 基，我们得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\boldsymbol{r}|\psi(t)\rangle=\frac{1}{2m}\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{P}^2|\psi(t)\rangle+\langle\boldsymbol{r}|V(\boldsymbol{R})|\psi(t)\rangle \tag{4.34.3}$$

相应于$|\psi(t)\rangle$的波函数是$\psi(\boldsymbol{r},t)=\langle\boldsymbol{r}|\psi(t)\rangle$我们还有

$$\langle \boldsymbol{r} \mid \boldsymbol{P}^2 \mid \psi(t)\rangle = \langle \boldsymbol{r} \mid (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \mid \psi(t)\rangle = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z,t)$$

$$= -\hbar^2\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{4.34.4}$$

并且考虑到$\langle\boldsymbol{r}|V(\boldsymbol{R})|\psi(t)\rangle = V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t)$.于是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{4.34.5}$$

(b) 我们一开始就将薛定谔方程投影到 $p$ 表象

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\boldsymbol{p}\mid\psi(t)\rangle = \frac{1}{2m}\langle\boldsymbol{p}\mid\boldsymbol{P}^2\mid\psi(t)\rangle + \langle\boldsymbol{p}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\psi(t)\rangle \tag{4.34.6}$$

动量表象中的波函数用$\overline{\psi}(\boldsymbol{p},t)=\langle\boldsymbol{p}|\psi(t)\rangle$定义,于是我们有

$$\langle\boldsymbol{p}\mid\boldsymbol{P}^2\mid\psi(t)\rangle = p^2\overline{\psi}(\boldsymbol{p},t) \tag{4.34.7}$$

为了计算方程(4.34.6)中$\langle\boldsymbol{p}|V(\boldsymbol{R})|\psi(t)\rangle$一项,我们在 $V(\boldsymbol{R})$和$|\psi(t)\rangle$之间插入 $p$ 表象中的完备性关系,得到

$$\langle\boldsymbol{p}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\psi(t)\rangle = \int\langle\boldsymbol{p}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\boldsymbol{p}'\rangle\langle\boldsymbol{p}'\mid\psi(t)\rangle\mathrm{d}^3p' \tag{4.34.8}$$

利用 $r$ 表象中的完备性关系,我们有

$$\langle\boldsymbol{p}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\boldsymbol{p}'\rangle = \int\langle\boldsymbol{p}\mid\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\boldsymbol{p}'\rangle\mathrm{d}^3r = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar}\langle\boldsymbol{r}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\boldsymbol{p}'\rangle\mathrm{d}^3r \tag{4.34.9}$$

我们还有

$$\langle\boldsymbol{r}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\boldsymbol{p}'\rangle = V(\boldsymbol{r})\langle\boldsymbol{r}\mid\boldsymbol{p}'\rangle = V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}'/\hbar} \tag{4.34.10}$$

于是,利用方程(4.34.8)到(4.34.10),我们看到

$$\langle\boldsymbol{p}\mid V(\boldsymbol{R})\mid\psi(t)\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\overline{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(\boldsymbol{p}',t)\mathrm{d}^3p' \tag{4.34.11}$$

这里

$$\overline{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')/\hbar}\mathrm{d}^3r \tag{4.34.12}$$

注意,$\overline{V}(\boldsymbol{p})$是 $V(\boldsymbol{r})$的傅里叶变换,最后,我们有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\overline{\psi}(\boldsymbol{p},t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m}\overline{\psi}(\boldsymbol{p},t) + \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\overline{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\overline{\psi}(\boldsymbol{p}',t)\mathrm{d}^3p' \tag{4.34.13}$$

**4.35** 证明算符 $\exp(-\mathrm{i}lp_x/\hbar)$描述距离为 $l$ 沿 $x$ 轴的平移.

**证** 在 $x$ 表象考虑问题.我们寻找一个算符 $A$,它作用于波函数 $\psi(x)$,使得

$$A\psi(x) = \psi(x-l) \tag{4.35.1}$$

利用泰勒展开,我们可以写出

$$\psi(x-l) = \psi(x) - l\psi'(x) + \frac{l^2}{2!}\psi''(x) + \cdots + \frac{(-l)^n}{n!}\psi^{(n)}(x) + \cdots \tag{4.35.2}$$

在 $x$ 表象中,动量算符的作用为 $p_x\psi(x)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$. 因此

$$\psi(x-l) = \psi(x) - \frac{\mathrm{i}l}{\hbar}p_x\psi(x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\mathrm{i}l}{\hbar}\right)^2p_x^2\psi(x) + \cdots + \frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}l}{\hbar}\right)^np_x^n\psi(x) + \cdots$$

$$= \exp\left(\frac{\mathrm{i}lp_x}{\hbar}\right)\psi(x) \tag{4.35.3}$$

**4.36** 假设在理论摘要中给出的假设除假设Ⅱ外都是成立的,即我们引入体系,其哈密顿量算

符不是厄米算符，考虑一个体系，其态空间是两维的. 设$|\phi_1\rangle$和$|\phi_2\rangle$形成态空间的正交归一基并且分别是哈密顿算符的属于本征值$E_1=5\hbar$和$E_2=(4-\mathrm{i})\hbar$的本征矢量，(a)假设在时刻$t=0$体系处于态$|\phi_1\rangle$. 在时刻$t$，体系处于$|\phi_1\rangle$的概率是多大；(b)对$|\phi_2\rangle$重复(a)的计算；(c)解释(a)和(b)的结果.

**解** (a)利用量子力学假设，时刻$t$的态矢量是

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/\hbar}|\phi_1\rangle = \mathrm{e}^{-5\mathrm{i}t}|\phi_1\rangle \tag{4.36.1}$$

于是，在时刻$t$，体系处于态$|\phi_1\rangle$的概率是$P_1(t)=|\mathrm{e}^{-5\mathrm{i}t}|^2=1$.

(b) 在所给条件下，我们有

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar}|\phi_2\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(4-2\mathrm{i})t}|\phi_2\rangle \tag{4.36.2}$$

体系处于态$|\phi_2\rangle$的概率是$p_2(t)=|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(4-2\mathrm{i})t}|^2=\mathrm{e}^{-4t}$.

(c) 检查结果，我们看到态$|\phi_2\rangle$是不稳定的. 在这个态找到体系的概率随时间指数衰减，而态$|\phi_1\rangle$的情况就不同. 它是稳定的. 保持初态永远不变. 这意味着哈密顿量算符不是厄米算符，因而不能严格地代表一个独立的物理体系. 更何况，物理体系还可能是大系统的一部分，因此在唯象上，复数能量的概念在考虑态的不稳性时将被证明是有用的.

**4.37** 考虑稳定势$V(\boldsymbol{r})$中的粒子. 证明

$$\mathrm{I}\ \frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{R}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\langle \boldsymbol{p}\rangle}{m},\qquad \mathrm{II}\ \frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{p}\rangle}{\mathrm{d}t} = -\langle \nabla V(\boldsymbol{R})\rangle \tag{4.37.1}$$

$I$和Ⅱ是熟知Ehrenfest方程，是经典的哈密顿-雅可比方程的类似.

**证** 我们从考虑系统的哈密顿量开始：

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{R}) \tag{4.37.2}$$

因为可观测量$\boldsymbol{p}$和$V(\boldsymbol{R})$不明显地依赖于时间，根据方程(4.55)我们有

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{R}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\boldsymbol{R},H]\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left\langle\left[\boldsymbol{R},\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right]\right\rangle \tag{4.37.3}$$

这里，我们使用了$\boldsymbol{R}$和$V(\boldsymbol{R})$对易的事实，利用正则对易关系，我们可以得到

$$\left\langle\left[\boldsymbol{R},\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right]\right\rangle = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\langle \boldsymbol{p}\rangle \tag{4.37.4}$$

所以，$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{R}\rangle}{\mathrm{d}t}=\langle \boldsymbol{p}\rangle/m$，对$\boldsymbol{p}$利用(4.55)并使用问题(4.9)的结果

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{P}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\boldsymbol{p},H]\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{R})]\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[-\mathrm{i}\hbar\nabla V(\boldsymbol{R})]\rangle = -\langle \nabla V(\boldsymbol{R})\rangle \tag{4.37.5}$$

请将此题和问题3.3进行比较.

**4.38** 假设在薛定谔图像中，所有算符都是时间无关的. (a)在海森伯图像中推导出表述算符$A_H(t)$时间演变的方程. (b) 证明方程(4.55)在海森伯图像中也是正确的.

**证** (a)在薛定谔图像中，联立薛定谔方程和方程(4.61)我们有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle = H_s U(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle \tag{4.38.1}$$

因为此方程对任何$|\psi_s(t_0)\rangle$都是成立的，我们得到$\mathrm{i}\hbar\partial U(t,t_0)/\partial t = H_s U(t,t_0)$. $H_s$是厄米算符，于是我们还有$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U^\dagger(t,t_0)=H_s U^\dagger(t,t_0)$. 我们将方程(4.59)对时间求导并得到

$$\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{\partial}{\partial t}U^\dagger(t,t_0)\right]A_s U(t,t_0) + U^\dagger(t,t_0)A_s\left[\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)\right] \tag{4.38.2}$$

代入时间导数的表达式，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[U^\dagger(t,t_0)H_s]A_s U(t,t_0) + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U^\dagger(t,t_0)A_s H_s U(t,t_0) \tag{4.38.3}$$

因为 $U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0)$ 等于单位算符,我们在 $A_s$ 和 $H_s$ 之间插入该乘积得到

$$\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[U^\dagger(t,t_0)H_sU(t,t_0)][U^\dagger(t,t_0)A_sU(t,t_0)]$$
$$+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[U^\dagger(t,t_0)A_sU(t,t_0)][U^\dagger(t,t_0)H_sU(t,t_0)] \tag{4.38.4}$$

利用方程(4.59),我们最后得到 $\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t}=[A_H(t),H_H(t)]$.

(b) 算符在海森伯图像中的平均值是

$$\langle A(t)\rangle=\langle\psi_H\mid A_H(t)\mid\psi_H\rangle \tag{4.38.5}$$

在方程(4.38.5)的右边,只有 $A_H(t)$ 依赖于时间,因此

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=\langle\psi_H\left|\left[\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t}\right]\right|\psi_H\rangle \tag{4.38.6}$$

我们假设,在薛定谔图像中,$A$ 是时间无关的,于是利用(a)的结果,我们得到

$$\frac{\mathrm{d}\langle A_H(t)\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[A_H,H_H(t)]\rangle \tag{4.38.7}$$

**4.39** 在本问题中,我们证明,对于一个保守体系,能量的不确定性越大,体系随时间变化越快,考虑具有连续谱的哈密顿量,并假设谱是非简并的.考虑具有不确定能量 $\Delta E$ 的态 $|\psi(t_0)\rangle$,证明如果体系在时间间隔 $\Delta t$ 内产生不容忽视的变化,那么

$$\Delta t\Delta E\geqslant\hbar \tag{4.39.1}$$

**证明** 态 $|\psi(t_0)\rangle$ 可以写成形式

$$|\psi(t_0)\rangle=\int\alpha(E)\mid\phi_E\rangle\mathrm{d}E \tag{4.39.2}$$

这里 $|\phi_E\rangle$ 是 $H$ 的具有本征值 $E$ 的本征态,我们定义一个态,对这个态 $|\alpha(E)|^2$ 具有图 4-2 中绘出的形状.

在这种情况下,$\Delta E$ 代表体系能量的不确定性,应用(4.53)态 $|\psi(t_0)\rangle$ 变化到

$$|\psi(t)\rangle=\int\alpha(E)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t_0)/\hbar}\mid\phi_E\rangle\mathrm{d}E \tag{4.39.3}$$

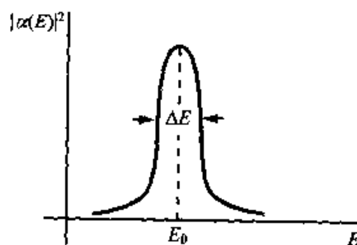


图 4-2

为估计体系产生不可忽略的变化所需的时间间隔,我们计算在态 $|\chi\rangle$ 找到体系的概率.该概率是

$$P(\chi,t)=|\langle\chi\mid\psi(t)\rangle|^2=\left|\int\alpha(E)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t_0)/\hbar}\langle\chi\mid\phi_E\rangle\mathrm{d}E\right|^2 \tag{4.39.4}$$

如果 $\Delta E$ 是充分之小,相对 $\alpha(E)$ 的变化,我们可以忽略 $\langle\chi|\phi_E\rangle$ 的变化;因而用 $\langle\chi|\phi_{E_0}\rangle$ 代替 $\langle\chi|\phi_E\rangle$,我们得到

$$P(\chi,t)\cong|\langle\chi\mid\phi_{E_0}\rangle|^2\left|\int\alpha(E)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t_0)/\hbar}\mathrm{d}E\right|^2 \tag{4.39.5}$$

因而,$P(\chi,t)$ 近似等于 $\alpha(E)$ 的傅里叶变换的模平方,利用傅里叶变换的性质,$P(\chi,t)$ 的宽度 $\Delta t$ 和 $\Delta E$ 有关,关系式为

$$\frac{\Delta t}{\hbar}\Delta E\geqslant 1 \tag{4.39.6}$$

这里 $\Delta t$ 是个时间周期,在这个周期内,在态 $|\chi\rangle$ 找到体系的概率不可忽略,因而它可以作为一个时间间隔的估计,在这个时间间隔内体系发生了不可忽略的变化.

## 补 充 习 题

**4.40** 考虑向 $\varepsilon$ 的子空间 $\varepsilon_m$ 的投影(参看 4.1 节),证明 $P_m^2 = P_m$.

**4.41** 在一组连续右矢的情况下,重新计算问题 4.13.

**4.42** 在一组离散右矢的情况下,重新计算问题 4.14.

**4.43** 考虑如下四个表达式($A$ 是一个算符)

(i) $\langle\psi|A|\phi\rangle\langle\psi|\phi\rangle$,(ii) $\langle\psi|\phi\rangle\langle\psi|A$,(iii) $\langle\psi|\phi\rangle A|\phi\rangle\langle\psi|$,(iv) $A|\psi\rangle\langle\phi|A|\psi\rangle$.

(a) 对每一个表达式,问它是属于标量、算符、右矢或左矢的哪一个? (b)求每一个表达式的厄米共轭.

**答案** (a) (i)标量,(ii)左矢;(iii)算符;(iv)右矢,(b)(i) $\langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle\langle\phi|\psi\rangle$,$\langle\psi|A|\phi\rangle^*\langle\psi|\phi\rangle^*$;

(ii) $\langle\psi|\phi\rangle^* A^\dagger|\psi\rangle$;(iii) $\langle\psi|\phi\rangle^*|\psi\rangle\langle\phi|A^\dagger$;(iv)$\langle\phi|A|\psi\rangle^*\langle\psi|A^\dagger$.

**4.44** 使用右矢和左矢在给定表象下的分量式推导标量积的表达式

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_i b_i^* C_i,\langle\phi|\psi\rangle = \int b^*(\alpha)C(\alpha)\mathrm{d}\alpha \qquad (4.44.1)$$

**4.45** 证明 $e^{2\pi ix/a}$ 和 $e^{-iap/\hbar}$ 对任何实数 $a$ 对易[提示:应用问题 4.9 的(b)].

**4.46** 证明两组正交归一基之间的变换矩阵(方程 4.29)是么正变换,即

$$SS^\dagger = S^\dagger S = 1$$

**4.47** 利用两组基$\{|u_i\rangle\}$和$\{|v_k\rangle\}$的正交归一和完备性关系导出方程(4.31),(4.32)和(4.33)

**4.48** 参考问题(4.28),(a)波包在 $t=0$ 的形状如何? (b)计算 $-1=0$ 时 $\Delta x\Delta p$.

**答案** (a)$\psi(x,0)=\sqrt{\dfrac{2k_0}{\pi}}\dfrac{1}{k_0^2x^2+1}$;(b)$\Delta x\Delta p=\hbar/\sqrt{2}$.

**4.49** 应用薛定谔方程,推导出方程(4.54).

**4.50** 推导出假设Ⅵ的方程(4.52)和(4.53).[提示,首先求哈密顿算符本征矢量的时间演化,然后利用薛定谔方程的性质(b);参看 4.9 节.]

**4.51** 求出描述动量的 $x$ 分量 $p_x$ 漂移的算符.(提示:与问题 4.36 比较.)

**答案** $e^{ip_0x/\hbar}$.

# 第五章 谐 振 子

## 5.1 导论

在本章,我们考虑粒子在简谐振子位势下的运动.

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (k = \text{常数}) \tag{5.1}$$

振子位势一般微分方程的求解方法在求解量子力学问题时常常用到.物理学中的许多问题在适当条件下可以简化成谐振子.例如,在经典力学中,在一个经典平衡点附近的展开式中,计算到第二阶,我们就得到简谐势 $kx^2/2$

薛定谔方程:一维谐振子的哈密顿量是

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \tag{5.2}$$

这里 $k = m\omega^2$,变数 $\omega$ 和 $m$ 分别是谐振子的角频率和质量,我们有

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{5.3}$$

于是,定态薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{5.4}$$

本征函数即薛定谔方程的解是

$$\psi_n(x) = \left(\frac{1}{\pi\lambda^2}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{H}_n\left(\frac{x}{\lambda}\right)\mathrm{e}^{-x^2/2\lambda^2} \tag{5.5}$$

这里 $\lambda = \sqrt{\hbar/m\omega}$,$\mathrm{H}_n(\zeta)$是厄米多项式.谐振子的本征值即本征能量是

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0,1,2,\cdots \tag{5.6}$$

## 5.2 厄米多项式

厄米多项式 $\mathrm{H}_n(\zeta)$是 $n$ 阶多项式,它对于偶数 $n$ 对称,对奇数 $n$ 反对称.厄米多项式是微分方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{H}_n(\zeta)}{\mathrm{d}\zeta^2} - 2\zeta\frac{\mathrm{dH}_n(\zeta)}{\mathrm{d}\zeta} + \left(\frac{2E_n}{\hbar\omega} - 1\right)H_n(\zeta) = 0 \tag{5.7}$$

的解,该方程可以简化为

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{H}_n(\zeta)}{\mathrm{d}\zeta^2} - 2\zeta\frac{\mathrm{dH}_n(\zeta)}{\mathrm{d}\zeta} + 2n\mathrm{H}_n(\zeta) = 0 \tag{5.8}$$

厄米多项式满足如下的关系:

$$\frac{\mathrm{dH}_n(\zeta)}{\mathrm{d}\zeta} = 2n\mathrm{H}_{n-1}(\zeta) \tag{5.9}$$

和

$$H_{n+1}(\zeta) = 2\zeta H_n(\zeta) - 2nH_{n-1}(\zeta) \tag{5.10}$$

厄米多项式的母函数是

$$S(\zeta,t) = e^{-t^2+2t\zeta} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\zeta)}{n!}t^n \tag{5.11}$$

和

$$H_n(\zeta) = \frac{d^n}{dt^n}[S(\zeta,t)]\Big|_{t=0} \tag{5.12}$$

有关厄米多项式的更多信息在数学附录中给出.

### 5.3 两维和三维谐振子

和一维情况相似,在两维情况下,哈密顿量是

$$H_2 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m\omega_x^2x^2}{2} + \frac{m\omega_y^2y^2}{2} \tag{5.13}$$

在这种情况下,哈密顿量是可以对 $x$ 和 $y$ 分离变数的,这样,问题就简化为两个一维谐振子,一个变量为 $x$,另一个变量为 $y$,在这种情况下,本征函数是

$$\psi_{n_xn_y}(x,y) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y) \tag{5.14}$$

这里 $\psi_{n_i}(x_i)$是一维谐振子的本征函数.相应于 $\psi_{n_xn_y}(x,y)$的本征值是

$$E_{n_xn_y} = \hbar\omega_x\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n_y + \frac{1}{2}\right) \tag{5.15}$$

推广到三维情况是简单易行的.

### 5.4 谐振子的算符方法

通过解薛定谔方程,可以把本征函数当作 $n$ 维矢量空间单位矢量的正交归一基.这里,我们想前进一步,只用算符求出本征值谱和本征函数,降算符和升算符,$a$ 和$a^\dagger$,定义为

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right), a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \tag{5.16}$$

这些算符对表示谐振子的本征函数来说是非常有用的工具,注意,谐振子的哈密顿算符可以写为

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{5.17}$$

$$H = \hbar\omega\left(aa^\dagger - \frac{1}{2}\right) \tag{5.18}$$

可以证明,这些算符的对易关系是

$$[a,a^\dagger] = 1, \quad [H,a] = -\hbar\omega a, \quad [H,a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \tag{5.19}$$

我们用$|n\rangle$表示谐振子的第 $n$ 个态$\psi_n(x)$,于是 $a$ 和$a^\dagger$ 满足方程(参看问题 5.10)

$$\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{cases} \tag{5.20}$$

现在,我们有理由将 $a$ 和 $a^\dagger$ 分别命名为降算符和升算符了.于是可以用这种方式

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \tag{5.21}$$

构成态 $|n\rangle$,这里 $|0\rangle$ 是真空态($n=0$).

## 例 题 解 答

**5.1** 一维谐振子用势

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{5.1.1}$$

描述.这里 $k$ 是正实数,可以证明角频率是 $\omega=\sqrt{k/m}$,这里 $m$ 是谐振子的质量.(a)对此势求解薛定谔方程并求出该系统的定态本征矢量;(b)参考(a),求出谐振子的能量本征值,最小的能量本征值是多少?并作出解释.

**解答**　(a)本系统的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \tag{5.1.2}$$

或

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{5.1.3}$$

于是本征值方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{5.1.4}$$

我们定义 $\epsilon=\frac{2E}{\hbar\omega}$ 并作变数变换 $\zeta=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$;因而,有

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi d\zeta}{d\zeta dx}\right) = \frac{d^2\psi}{d\zeta^2}\left(\frac{d\zeta}{dx}\right)^2 = \frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} \tag{5.1.5}$$

所以

$$\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2\psi(\zeta)}{d\zeta^2} + E\psi(\zeta) - \frac{\hbar\omega}{2}\zeta^2\psi(\zeta) = 0 \tag{5.1.6}$$

或

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + (\epsilon - \zeta^2)\psi = 0 \tag{5.1.7}$$

对于大的 $\zeta$(大的 $x$)微分方程(5.1.7)的主要部分是

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} - \zeta^2\psi = 0 \tag{5.1.8}$$

该方程的解具有波函数在 $\zeta$ 很大时的渐近行为

$$\psi(\zeta) \sim e^{-\zeta^2/2} \tag{5.1.9}$$

于是,我们可设

$$\psi(\zeta) = H(\zeta)e^{-\zeta^2/2} \tag{5.1.10}$$

代入(5.1.8)得到

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} = \frac{d}{d\zeta}[H'(\zeta)e^{-\zeta^2/2} - \zeta H(\zeta)e^{-\zeta^2/2}]$$

$$= H''(\zeta)e^{-\zeta^2/2} - 2\zeta H'(\zeta)e^{-\zeta^2/2} - H(\zeta)e^{-\zeta^2/2} + \zeta^2 H(\zeta)e^{-\zeta^2/2} \tag{5.1.11}$$

或

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2}=[H''-2\zeta H'+(\zeta^2-1)H]e^{-\zeta^2/2} \tag{5.1.12}$$

于是我们有

$$[H''-2\zeta H'+(\zeta^2-1)H]e^{-\zeta^2/2}+(\varepsilon-\zeta^2)He^{-\zeta^2/2}=0 \tag{5.1.13}$$

我们得到厄米多项式微分方程

$$\frac{d^2H(\zeta)}{d\zeta^2}-2\zeta\frac{dH(\zeta)}{d\zeta}+(\varepsilon-1)H(\zeta)=0 \tag{5.1.14}$$

波函数在 $\zeta=0(x=0)$附近的行为由这些多项式来说明，为了解该方程，我们用 $H(\zeta)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\zeta^n$ 代入，于是

$$\frac{d^2H}{d\zeta^2}=\sum_{n=0}^{\infty}a_n n(n-1)\zeta^{n-2}=\sum_{n=0}^{\infty}a_{n+2}(n+2)(n+1)\zeta^n \tag{5.1.15}$$

和

$$-2\zeta\frac{dH}{d\zeta}=-\sum_{n=0}^{\infty}2na_n\zeta^n \tag{5.1.16}$$

所以

$$\sum_{n=0}^{\infty}[a_{n+2}(n+2)(n+1)-2na_n+(\varepsilon-1)a_n]\zeta^n=0 \tag{5.1.17}$$

因此，该级数的所有系数都必须为零

$$a_{n+2}(n+2)(n+1)+(\varepsilon-2n-1)a_n=0 \tag{5.1.18}$$

或

$$a_{n+2}=\frac{2n+1-\varepsilon}{(n+2)(n+1)}a_n \tag{5.1.19}$$

我们令 $a_o\neq0$ 和 $a_1=0$，以 $a_2$、$a_4$、…、$a_{2m}$ 的值($m$＝正整数)，同样令 $a_0=0$ 和 $a_1\neq0$ 以求出 $a_3$、$a_5$、…、$a_{2m-1}$ 的值($m$＝正整数)，$a_0$ 或 $a_1$ 的值由波函数的归一化条件算出.

(b) 如在(a)那样，我们希望波函数在 $\zeta$ 很大时渐近地趋向 $e^{-\zeta^2/2}$，一开始，对某些 $n$，我们令 $H(\zeta)$的系数为零，对那些 $n$，我们得到

$$2n+1-\varepsilon=0 \tag{5.1.20}$$

即 $\varepsilon=2n+1$，或

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{5.1.21}$$

因此，我们得到能量本征值的量子化条件，没有能源，体系在温度 $T=0$ 达到其最小能量本征值 $E_0=\hbar\omega/2$. 该值是测不准关系

$$\Delta x\Delta p=\hbar/2 \tag{5.1.22}$$

强加给谐振子的，是系统能够具有的最小能量本征值.

**5.2** 一个粒子具有能量 $E=\hbar\omega/2$，在谐振势下运动，计算粒子在经典禁区出现的概率. 将结果和粒子出现在更高能级的概率进行比较.

**解** 对经典谐振子，我们有

$$x=A_n\cos\omega t,\quad p=-mA_n\omega\sin\omega t \tag{5.2.1}$$

因此能量是

$$E_n=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\frac{m\omega^2A_n^2}{2} \tag{5.2.2}$$

上式给出 $A_n=\sqrt{\frac{2En}{m\omega^2}}$,经典禁区是 $|x|>A_n$ 或 $|x|>\sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}}$. 于是在经典禁区找到粒子的概率是

$$P_n=\int_{-\infty}^{-A_n}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x+\int_{A_n}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x=2\int_{A_n}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x$$

$$=1-2\int_{\infty}^{A_n}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x \tag{5.2.3}$$

考虑基态,我们有

$$P_0=2\int_{A_0}^{\infty}\psi_0^*(x)\psi_0(x)\mathrm{d}x=2\sqrt{\frac{1}{\pi\lambda^2}}\int_{A_0}^{\infty}\mathrm{e}^{-x^2/\lambda^2}\mathrm{d}x \tag{5.2.4}$$

做积分变数变换 $\eta=x/\lambda$,我们有

$$P_0=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{A_0/\lambda}^{\infty}\mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta=1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{A_0/\lambda}\mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta \tag{5.2.5}$$

我们有 $A_0/\lambda=1$;所以

$$P_0=1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1\mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta \tag{5.2.6}$$

数值法求解上式,我们得到 $P_0=0.1578$(参看问题 12.8).

对于激发态,粒子出现在经典禁区的概率是

$$P_n=1-2\int_0^{A_n}\frac{1}{\sqrt{\pi\lambda^2}2^n n!}\mathrm{H}_n^2\left(\frac{x}{\lambda}\right)\mathrm{e}^{-x^2/\lambda^2}\mathrm{d}x=1-\frac{1}{\sqrt{\pi}2^{n-1}n!}\int_0^{A_n}\mathrm{H}_n^2\left(\frac{x}{\lambda}\right)\mathrm{e}^{-x^2/\lambda^2}\mathrm{d}\left(\frac{x}{\lambda}\right) \tag{5.2.7}$$

令 $\eta=x/\lambda$,我们得到

$$P_n=1-\frac{1}{\sqrt{\pi}2^{n-1}n!}\int_0^{A_n/\lambda}\mathrm{H}_n^2(\eta)\mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta \tag{5.2.8}$$

利用熟知的厄米多项式 $\mathrm{H}_0(\eta)=1,\mathrm{H}_1(\eta)=2\eta,\mathrm{H}_2(\eta)=4\eta^2-2$ 和 $A_1/\lambda=\sqrt{3}$. 我们得到

$$P_1=1-\frac{4}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\sqrt{3}}\eta^2\mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta \tag{5.2.9}$$

数值解是 $P_1=0.1116$,我们还有

$$P_2=1-\frac{1}{4\sqrt{\pi}}\int_0^{\sqrt{5}}(16\eta^4-16\eta^2+4)\mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta=1-\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\sqrt{5}}(4\eta^4-4\eta^2+1)\mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta=0.0951 \tag{5.2.10}$$

这样,我们已经看到 $P_0=0.1573,P_1=0.1116,P_2=0.0951$,注意 $P_n$,能级越高它的值越小. 出现这种情况的原因是:能量高的粒子比能量低的粒子"更经典",所以,具有高能量的粒子出现在经典禁区的概率小.

**5.3** 利用测不准关系 $\Delta p\Delta x\geqslant\hbar/2$,估计谐振子的基态能量.

**解** 谐振子的哈密顿量是

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{5.3.1}$$

能量的期望值是

$$\langle H\rangle=E=\frac{\langle p^2\rangle}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle \tag{5.3.2}$$

我们可以写出

$$\Delta p^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2,\qquad \Delta x^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2 \tag{5.3.3}$$

对于谐振子 $\langle p\rangle=\langle x\rangle=0$ 这些结果的证明如下:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)x\psi_n(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}x\mid\psi_n(x)\mid^2\mathrm{d}x \tag{5.3.4}$$

反对称函数 $x|\psi_n(x)|^2$ 在对称区间上的积分为零，所以$\langle x\rangle=0$同样，

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\frac{\partial\psi_n(x)}{\partial x}\mathrm{d}x \tag{5.3.5}$$

做变数变换 $\zeta=x/\lambda$ 和$\lambda=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$,我们有

$$\langle p\rangle = -\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(\zeta)\frac{\partial\psi_n(\zeta)}{\partial\zeta}\mathrm{d}\zeta \tag{5.3.6}$$

或

$$\frac{\partial\psi_n(\zeta)}{\partial\zeta} = \frac{\partial\mathrm{H}_n(\zeta)}{\partial\zeta}\frac{\mathrm{e}^{-\zeta^2/2}}{\sqrt{\pi\lambda2^n n!}} + \zeta\psi_n(\zeta) \tag{5.3.7}$$

于是，我们得到

$$\langle p\rangle = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\sqrt{\pi\lambda2^n n!}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(\zeta)\frac{\partial H_n}{\partial\zeta}\mathrm{e}^{-\zeta^2/2}\mathrm{d}\zeta - \mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\zeta)\psi(\zeta)\zeta\mathrm{d}\zeta \tag{5.3.8}$$

注意到

$$\langle x\rangle \sim \int\psi^*(\zeta)\psi(\zeta)\zeta\mathrm{d}\zeta = 0 \tag{5.3.9}$$

因为厄米多项式要么是对称的，要么是反对称的，那么乘积 $\mathrm{H}_n(\zeta)\frac{\partial\mathrm{H}_n(\zeta)}{\partial x}$就总是反对称的. 基于$\langle x\rangle$为零同样的理由$\langle p\rangle$也为零，于是

$$E = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\Delta x^2 \tag{5.3.10}$$

根据测不准关系，$\Delta p$ 的最小值是 $\Delta p=\frac{\hbar}{2\Delta x}$；所以

$$E = \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \frac{m\omega^2}{2}\Delta x^2 \tag{5.3.11}$$

最后 $E(\Delta x)$的最小值用

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}(\Delta x)} = -\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3} + m\omega^2\Delta x = 0 \tag{5.3.12}$$

得到，于是 $\Delta x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$，还有

$$\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}(\Delta x)^2}\bigg|_{\Delta x=\Delta x_0} = \frac{3\hbar^2}{4m(\Delta x)^4} + m\omega^2 > 0 \tag{5.3.13}$$

所以，最小值如我们预期的那样是

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{4m(\Delta x_0)^2} + \frac{m\omega^2}{2}(\Delta x_0)^2 = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{5.3.14}$$

这里，我们用测不准关系的下限 $\Delta x\Delta p=\hbar/2$，求得精确解，这一结果的起因为基态本征函数是高斯型

$$\psi(x) = (2\pi\sigma)^{1/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{e}^{(x-x_0)^2/4\sigma^2} \tag{5.3.15}$$

虽然，测不准关系通常用来估算基态能量本征值，但对上述情况我们可以精确求值.

**5.4** 求出两维各向同性谐振子的本征函数和本征值；求能级的简并度，该系的哈密顿量是

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2) \tag{5.4.1}$$

**解** 系统的哈密顿量可以分成两部分 $H=H_x+H_y$，这里

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2},\quad H_y = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 y^2}{2} \tag{5.4.2}$$

因而波函数可以写成两个波函数的乘积，$\psi_x(x)$（$H_x$ 的本征函数）和 $\psi_y(y)$（$H_y$ 的本征函数），它们分别具有本征值 $E_x = \hbar\omega\left(n_y + \frac{1}{2}\right)$和 $E_y = \hbar\omega(n_y + \frac{1}{2})$，于是我们有 $H\psi = E\psi$，这里 $\psi(x,y) = \psi_x(x)\psi_y(y)$；因此

$$\begin{aligned} H\psi(x,y) &= (H_x + H_y)\psi_x(x)\psi_y(y) = H_x\psi_x(x)\psi_y(y) + \psi_x(x)H_y\psi_y(y) \\ &= E_x\psi_x\psi_y + E_y\psi_x\psi_y = (E_x + E_y)\psi_x\psi_y \end{aligned} \tag{5.4.3}$$

所以有

$$E = E_x + E_y = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega \equiv (n+1)\hbar\omega \tag{5.4.4}$$

每个态 $E(n_x, n_y)$的简并度计算如下：$(n+1)$是从 0 到∞的一个整数.

从图 5-1 我们可以看到$(n+1)$ = 常数在 $n_x n_y$ 空间定义一条直线，且态 $n$ 的简并度是 $n+1$.

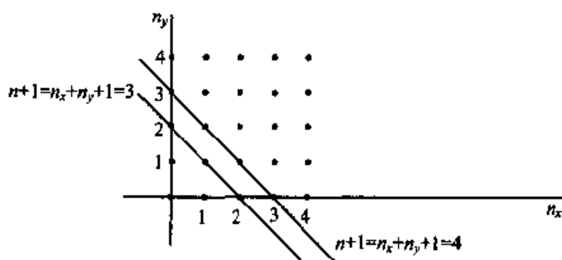



图 5-1

**5.5** 考虑位于电场 $\boldsymbol{E} = E_0\boldsymbol{x}$ 内且在三维各向同性势

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \tag{5.5.1}$$

下运动的带电荷 $+e$ 的粒子，求粒子的本征态和本征值.

**解：** 系统的哈密顿量是

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}r^2 - eE_0 x \tag{5.5.2}$$

我们将哈密顿量分成三部分 $H = H_x + H_y + H_z$，这里

$$\begin{cases} H_x = \dfrac{p_x^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}x^2 - eE_0 x \\ H_y = \dfrac{p_y^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}y^2 \\ H_z = \dfrac{p_z^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}z^2 \end{cases} \tag{5.5.3}$$

注意 $H_y$ 和 $H_z$ 完全和一维谐振子的哈密顿量相同，于是我们可以将波函数写成 $\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$，这里 $\psi_2(y)$和 $\psi_3(z)$是一维谐振子的波函数

$$\begin{cases} \psi_2(y) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi\lambda 2^{n_2} n_2!}} \mathrm{H}_{n_2}(y)\mathrm{e}^{-y^2/2\lambda^2} \\ \psi_3(z) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi\lambda 2^{n_3} n_3!}} \mathrm{H}_{n_3}(z)\mathrm{e}^{-z^2/2\lambda^2} \end{cases} \tag{5.5.4}$$

式中 $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$，$\psi_1(x)$的方程是

$$H_x\psi_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi_1 - eE_0 x\psi_1 = E_1\psi_1 \tag{5.5.5}$$

作变数替换 $\zeta = \frac{x}{\lambda} - \frac{eE_0}{\sqrt{\hbar m\omega}}$给出

$$\frac{d^2\psi_1}{d\zeta^2} + \left(\frac{2E_1}{\hbar\omega} + \frac{(eE_0)^2}{\sqrt{\hbar m\omega^3}}\right)\psi_1 - \zeta^2\psi_1 = 0 \tag{5.5.6}$$

我们得到一维谐振子的微分方程,其解为

$$\psi_1(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{\pi\lambda 2^{n_1} n_1!}}H_{n_1}(\zeta)e^{-\zeta^2/2} \tag{5.5.7}$$

或

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi\lambda 2^{n_1} n_1!}}H_{n_1}(x)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{eE_0}{\sqrt{\hbar m\omega^3}}\right)^2\right] \tag{5.5.8}$$

在这种情况下,量子化条件是

$$\frac{2E_1}{\hbar\omega} + \frac{(eE_0)^2}{\hbar m\omega^3} = 2n_1 + 1 \tag{5.5.9}$$

于是能量本征值是

$$(E_1)_{n_1} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{(eE_0)^2}{2m\omega^2} \tag{5.5.10}$$

总之,波函数是

$$\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) \tag{5.5.11}$$

本征能量是

$$E_{n_1n_2n_3} = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega - \frac{(eE_0)^2}{2m\omega^2} \tag{5.5.12}$$

**5.6** 考虑一维谐振势中质量为 $m$ 的粒子,在时刻 $t=0$,归一化波函数是

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4}e^{-x^2/2\sigma^2} \tag{5.6.1}$$

这里 $\sigma^2 \neq \frac{\hbar}{m\omega}$是个常数,求 $t>0$ 时粒子的动量为 $E$ 值的概率.

**解答** 我们用 $\tilde{\psi}(p,t)$表示在时刻 $t$ 粒子在动量空间的波函数,粒子动量为 $E$ 的概率$P$是

$$P = \int_0^\infty |\tilde{\psi}(p,t)|^2 dp \tag{5.6.2}$$

我们可以将 $\tilde{\psi}(p,t)$写成动量空间本征函数的线性组合

$$\tilde{\psi}(p,t) = \sum_{n=0}^\infty C_n\bar{\phi}_n(p)e^{-i(n+1/2)\omega t} \tag{5.6.3}$$

这里 $\bar{\phi}_n(p)$是动量空间的定态本征函数,系数是 $C_n = \langle\phi_n(x)|\psi(x)\rangle$注意 $\phi_n(x)$是坐标空间的本征函数,$\psi(x,t)$也可以写为

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n\phi_n(x)e^{-i(n+1/2)\omega t} \tag{5.6.4}$$

$\phi_n(x)$象 $\bar{\phi}_n(p)$(它们的傅里叶变换)一样,不是对称的,就是反对称的.这种属性对任何时间 $t$ 都是不变的.因而 $\tilde{\psi}(p,0)$是对称的,$\tilde{\psi}(p,0) = \tilde{\psi}(-p,0)$,就有 $\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}(-p,t)$,

$$\int_0^\infty |\tilde{\psi}(p,t)|^2 dp = \int_0^\infty |\tilde{\psi}(-p,t)|^2 dp = -\int_0^{-\infty} |\tilde{\psi}(+p,t)|^2 dp = \int_{-\infty}^0 |\tilde{\psi}(p,t)|^2 dp \tag{5.6.5}$$

应用 $\psi(p,t)$ 是归一化的，即

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\bar{\psi}(p,t)|^2 \mathrm{d}p = \int_0^{\infty} |\bar{\psi}(p,t)|^2 \mathrm{d}p + \int_{-\infty}^{0} |\bar{\psi}(p,t)|^2 \mathrm{d}p = 1 \tag{5.6.6}$$

我们得到

$$P = \int_0^{\infty} |\bar{\psi}(p,t)|^2 \mathrm{d}p = \int_{-\infty}^{0} |\bar{\psi}(p,t)|^2 \mathrm{d}p = \frac{1}{2} \tag{5.6.7}$$

**5.7** (a)利用问题 5.6 中的初始条件，计算 $\psi(x,t)$.(b)如果 $t=0$ 时，粒子处于态

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_0(x) + \phi_1(x)] \tag{5.7.1}$$

这里 $\phi_n(x)$ 是一维谐振子的本征函数，计算 $t>0$ 时 $x$ 的期望值.

**解** ☞ (a)首先，注意到给定的 $\psi(x)$ 不是 $\psi_n(x)$(本征函数).因为 $\sigma^2 \neq \frac{\hbar}{m\omega}$，于是为求出 $\psi(x,t)$，我们必须将 $\psi(x)$ 写成本征函数 $\phi_n(x)$ 的线性组合

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \phi_n(x) \tag{5.7.2}$$

和

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \phi_n(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n+1/2)\omega t} \tag{5.7.3}$$

这里

$$C_n = \langle \phi_n(x) | \psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) \psi(x) \mathrm{d}x \tag{5.7.4}$$

现在，设 $\lambda^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$，我们有

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}\lambda 2^n n!}} \mathrm{H}_n\left(\frac{x}{\lambda}\right) \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\lambda}\right)^2\right] \tag{5.7.5}$$

于是

$$C_n = \frac{1}{(\sqrt{\pi}2^n \lambda n!)^{1/2}} \frac{1}{(\sqrt{\pi}\sigma)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{H}_n\left(\frac{x}{\lambda}\right) \exp\left[-\frac{1}{2}x^2\left(\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\sigma^2}\right)\right] \mathrm{d}x \tag{5.7.6}$$

回忆 $\mathrm{H}_n(x/\lambda)$ 要么是对称的(对偶数 $n$)，要么是反对称的(对奇数 $n$)；所以，由于 $\mathrm{H}_n(x/\lambda)$ 是反对称的而 $\exp\left[-\frac{1}{2}x^2\left(\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda^2}\right)\right]$ 是对称的，对奇数 $n$，$C_n$ 为零.这样，我们就只要计算

$$C_{2m} = \frac{1}{[\pi 4^m (2m)! \sigma\lambda]^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{H}_{2m}\left(\frac{x}{\lambda}\right) \exp\left[-\frac{1}{2}x^2\left(\frac{\sigma^2+\lambda^2}{\lambda^2\sigma^2}\right)\right] \mathrm{d}x \tag{5.7.7}$$

代入变数 $\eta = \sqrt{\frac{\sigma^2+\lambda^2}{2\lambda^2\sigma^2}}$ 和 $x = \sqrt{\frac{2\lambda^2\sigma^2}{\lambda^2+\sigma^2}}\eta$ 我们得到

$$\begin{aligned} C_{2m} &= \frac{1}{\sqrt{\pi 4^m (2m)! \lambda\sigma}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{H}_{2m}\left(\sqrt{\frac{2\sigma^2}{\lambda^2+\sigma^2}}\eta\right) \mathrm{e}^{-\eta^2} \sqrt{\frac{2\lambda^2\sigma^2}{\lambda^2+\sigma^2}} \mathrm{d}\eta \\ &= \sqrt{\frac{2\lambda\sigma}{\pi 4^m (2m)! (\lambda^2+\sigma^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{H}_{2m}\left(\sqrt{\frac{2\sigma^2}{\lambda^2+\sigma^2}}\eta\right) \mathrm{e}^{-\eta^2} \mathrm{d}\eta \end{aligned} \tag{5.7.8}$$

利用恒等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{H}_{2m}(ax) \mathrm{e}^{-x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\pi} \frac{(2m)!}{m!} (a^2-1)^m \tag{5.7.9}$$

我们得到

$$C_{2m} = \sqrt{\frac{2\lambda\sigma(2m)!}{4^m (m!)^2 (\lambda^2+\sigma^2)}} \left(\frac{\sigma^2-\lambda^2}{\sigma^2+\lambda^2}\right)^m \tag{5.7.10}$$

或

$$\psi(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}\sigma_{2n}\psi_{2n}(x)e^{-(2n+1/2)\omega t} \tag{5.7.11}$$

(b)在 $t=0$ 有

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_0(x)+\phi_1(x)] \tag{5.7.12}$$

于是,当 $t>0$,有

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_0(x)e^{-i\omega t/2}+\phi_1(x)e^{-3i\omega t/2}] \tag{5.7.13}$$

根据定义 $x$ 的期望值是

$$\langle x\rangle=\langle\psi(x,t)\mid x\mid\psi(x,t)\rangle=\frac{1}{2}[\langle\phi_0(x)\mid x\quad\phi_0(x)\rangle+\langle\phi_1(x)\mid x\mid\phi_1(x)\rangle$$
$$+e^{-i\omega t}\langle\phi_0(x)\mid x\mid\phi_1(x)\rangle+e^{i\omega t}\langle\phi_1(x)\mid x\mid\phi_0(x)\rangle] \tag{5.7.14}$$

我们分别计算上式中的每一项

$$\langle\phi_0(x)\mid x\mid\phi_0(x)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\phi_0^*(x)\phi_0(x)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\mid\phi_0(x)\mid^2dx \tag{5.7.15}$$

因为$|\phi_0(x)|^2$ 是对称函数,而 $x$ 是反对称函数,在对称区间上积分为零,$\langle\phi_0(x)|x|\phi_0(x)\rangle=0$ 以及 $\langle\phi_n(x)|x|\phi_n(x)\rangle=0$.现在,我们来计算

$$\langle\phi_0(x)\mid x\mid\phi_1(x)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\phi_0^*(x)\phi_1(x)dx=\frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}\lambda}}\frac{1}{\sqrt{2\pi^{1/2}\lambda}}\int_{-\infty}^{\infty}H_0\left(\frac{x}{\lambda}\right)H_1\left(\frac{x}{\lambda}\right)xe^{-x^2/\lambda^2}dx \tag{5.7.16}$$

我们有 $H_0(x/\lambda)=1$ 和 $H_1(x/\lambda)=2x/\lambda$(参看数学附录),因而

$$\langle\phi_0(x)\mid x\mid\phi_1(x)\rangle=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{\lambda^2}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-x^2/\lambda^2}dx=\sqrt{\frac{1}{2\lambda^2}} \tag{5.7.17}$$

则$\langle\phi_0(x)|x|\phi_1(x)\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$和

$$\langle\phi_1(x)\mid x\mid\phi_0(x)\rangle=\langle\phi_0(x)\mid x\mid\phi_1(x)\rangle^*=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{5.7.18}$$

这样,我们最后得到

$$\langle x\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos(\omega t) \tag{5.7.19}$$

**5.8** 考虑具有哈密顿量

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{5.8.1}$$

的一维谐振子,我们定义新的算符

$$P=\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}},\quad Q=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{5.8.2}$$

于是 $H=\frac{\hbar\omega}{2}(Q^2+P^2)$.(a)计算对易关系$[P,Q]$(b)于算符 $a$ 和$a^\dagger$ 定义为

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q+iP)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\frac{i}{m\omega}p \tag{5.8.3}$$

$$a^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q-iP)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\frac{i}{m\omega}p \tag{5.8.4}$$

计算 $a|n\rangle$ 和 $a^\dagger|n\rangle$，这里 $|n\rangle$ 是谐振子第 $n$ 个能态的本征函数.

**解答** (a)我们应用熟知的对易关系 $[x,p]=\mathrm{i}\hbar$，于是有

$$[P,Q]=\left[\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}},x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right]=\frac{1}{\hbar}[p,x]=-\mathrm{i} \tag{5.8.5}$$

(b)利用(a)的结果，可以写出

$$\begin{aligned}a^\dagger a&=\frac{1}{2}(Q-\mathrm{i}P)(Q+\mathrm{i}P)=\frac{1}{2}[Q^2+P^2-\mathrm{i}(PQ-QP)]\\&=\frac{1}{2}(Q^2+P^2-\mathrm{i}[P,Q])=\frac{1}{2}(Q^2+P^2-1)\end{aligned} \tag{5.8.6}$$

代入(5.8.1)，我们有

$$H=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right) \tag{5.8.7}$$

现在，我们开始计算 $a$ 和 $a^\dagger$ 的对易关系

$$[a^\dagger,a]=\frac{1}{2}[Q-\mathrm{i}P,Q+\mathrm{i}P]=\mathrm{i}[Q,P]=-1 \tag{5.8.8}$$

于是 $a^\dagger a-aa^\dagger=-1$，因此，我们得到

$$H=\hbar\omega\left(aa^\dagger-\frac{1}{2}\right) \tag{5.8.9}$$

我们还须要计算 $a$ 和 $a^\dagger$ 与 $H$ 的对易关系

$$[a,H]=\hbar\omega[a,a^\dagger a]=\hbar\omega[a,a^\dagger]a=\hbar\omega a \tag{5.8.10}$$

同样地

$$[a^\dagger,H]=\hbar\omega[a^\dagger,aa^\dagger]=\hbar\omega[a^\dagger,a]a^\dagger=-\hbar\omega a^\dagger \tag{5.8.11}$$

这样，利用能量的本征值方程 $H|n\rangle=\hbar\omega(n+1/2)|n\rangle$，我们可以写成

$$H|n\rangle=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right)|n\rangle \tag{5.8.12}$$

所以 $a^\dagger a|n\rangle=n|n\rangle$ 同样

$$H|n\rangle=\hbar\omega\left(aa^\dagger-\frac{1}{2}\right)|n\rangle \tag{5.8.13}$$

于是 $aa^\dagger|n\rangle=(n+1)|n\rangle$，我们用 $a^\dagger=-\frac{1}{\hbar\omega}[a^\dagger,H]$ 作用于态 $|n\rangle$，于是

$$a^\dagger|n\rangle=-\frac{a^\dagger H}{\hbar\omega}|n\rangle+\frac{Ha^\dagger}{\hbar\omega}|n\rangle=-\left(n+\frac{1}{2}\right)a^\dagger|n\rangle+\frac{Ha^\dagger}{\hbar\omega}|n\rangle \tag{5.8.14}$$

或

$$H(a^\dagger|n\rangle)=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)(a^\dagger|n\rangle) \tag{5.8.15}$$

所以，我们断定 $a^\dagger|n\rangle$ 是正比于 $|n+1\rangle$ 的态. 即

$$|\psi_+\rangle\equiv a^\dagger|n\rangle=\alpha_+|n+1\rangle \tag{5.8.16}$$

这里 $\alpha_+$ 是常数，由式

$$\alpha_+^2=\langle\psi_+|\psi_+\rangle=\langle n|aa^\dagger|n\rangle \tag{5.8.17}$$

给出，我们已经看到 $aa^\dagger|n\rangle=(n+1)|n\rangle$，样 $\alpha_+^2=n+1$，选择 $\alpha_+=\sqrt{n+1}$，我们最终得到

$$a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{5.8.18}$$

同样，我们将 $a=\frac{1}{\hbar\omega}[a,H]$ 作用于态 $|n\rangle$，并求出

$$a \mid n\rangle = \frac{aH}{\hbar\omega} \mid n\rangle - \frac{Ha}{\omega\hbar} \mid n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)(a \mid n\rangle) - \frac{H}{\omega\hbar}(a \mid n\rangle) \tag{5.8.19}$$

或

$$H(a \mid n\rangle) = \hbar\omega\left(n - \frac{1}{2}\right)(a \mid n\rangle) \tag{5.8.20}$$

所以,我们断定 $a|n\rangle$是正比于$|n-1\rangle$的,即

$$\mid \psi_{-}\rangle = a \mid n\rangle = \alpha - \mid n - 1\rangle \tag{5.8.21}$$

这里 $\alpha_{-}$ 也是常数

$$\alpha_{-}^{2} = \langle \psi_{-} \mid \psi_{-}\rangle = \langle n \mid a^{\dagger}a \mid n\rangle \tag{5.8.22}$$

我们已经看到 $a^{\dagger}a|n\rangle = n|n\rangle$,所以 $\alpha_{-}^{2} = n$,选取 $d = \sqrt{n}$,我们得到

$$a \mid n\rangle = \sqrt{n} \mid n - 1\rangle \tag{5.8.23}$$

注意,如果我们将 $a$ 作用于基态$|0\rangle$,我们得到

$$a \mid 0\rangle = 0 \tag{5.8.24}$$

这样,我们按照上述定义引入降算符和升算符 $a$ 和$a^{\dagger}$ 满足如下方程:

$$\begin{cases} a \mid n\rangle = \sqrt{n} \mid n - 1\rangle \\ a^{\dagger} \mid n\rangle = \sqrt{n+1} \mid n + 1\rangle \end{cases} \tag{5.8.25}$$

**5.9** 对一维谐振子,计算算符 $x$ 和 $p$ 的矩阵元,有

$$x_{nk} = \langle n \mid x \mid k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) x \phi_k(x) \mathrm{d}x \tag{5.9.1}$$

$$p_{nk} = \langle n \mid p \mid k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) p \phi_k(x) \mathrm{d}x \tag{5.9.2}$$

这里 $\phi_k(x)$是谐振子的本征函数

**解答:** 用降算符和升算符写出 $x$ 和 $p$

$$x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(a + a^{\dagger}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^{\dagger}) \tag{5.9.3}$$

同样

$$p = \frac{m\omega}{2\mathrm{i}}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(a - a^{\dagger}) = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^{\dagger} - a) \tag{5.9.4}$$

由此我们可以计算

$$\langle n \mid x \mid k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle n \mid (a + a^{\dagger}) \mid k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle n \mid a \mid k\rangle + \langle n \mid a^{\dagger} \mid k\rangle) \tag{5.9.5}$$

我们看到过

$$\begin{cases} a \mid k\rangle = \sqrt{k} \mid k - 1\rangle \\ a^{\dagger} \mid k\rangle = \sqrt{k+1} \mid k + 1\rangle \end{cases} \tag{5.9.6}$$

所以,我们有

$$\langle n \mid x \mid k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{k}\langle n \mid k - 1\rangle + \sqrt{k+1}\langle n \mid k + 1\rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{k}\delta_{n,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{n,k+1}) \tag{5.9.7}$$

这里

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases} \tag{5.9.8}$$

所以

$$\langle n | x | k \rangle = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{\hbar(n+1)}{2m\omega}}, & k = n+1 \\ \sqrt{\dfrac{\hbar n}{2m\omega}}, & k = n-1 \\ 0, & \text{其余} \end{cases} \tag{5.9.9}$$

用同样的方法,我们可以计算

$$\begin{aligned} \langle n | p | k \rangle &= \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\langle n | (a^\dagger - a) | k \rangle \\ &= \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\langle n | a^\dagger | k \rangle - \langle n | a | k \rangle) \end{aligned} \tag{5.9.10}$$

现在,应用关系式(5.9.6)我们有

$$\langle n | p | k \rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\sqrt{k+1}\langle n | k+1 \rangle - \sqrt{k}\langle n | k-1 \rangle) = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\sqrt{k+1}\delta_{n,k+1} - \sqrt{k}\delta_{n,k-1}) \tag{5.9.11}$$

于是,我们得到

$$\langle n | p | k \rangle = \begin{cases} \mathrm{i}\sqrt{\dfrac{m\omega\hbar n}{2}}, & k = n-1 \\ -\mathrm{i}\sqrt{\dfrac{m\omega\hbar(n+1)}{2}}, & k = n+1 \\ 0 \end{cases} \tag{5.9.12}$$

我们可以用矩阵形式将$\langle n|x|k\rangle$和$\langle n|p|k\rangle$表示为

$$\langle n | x | k \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3}\cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\cdots \\ \vdots & \vdots & & \end{pmatrix} \tag{5.9.13}$$

和

$$\langle n | p | k \rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3}\cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\cdots \\ \vdots & \vdots & & \end{pmatrix} \tag{5.9.14}$$

如所预期,$x$ 和 $p$ 都用厄米矩阵表示.

**5.10** 考虑处于第 $n$ 能级的一维谐振子,计算期望值

$$\langle x^2 \rangle, \langle x \rangle, \langle p^2 \rangle, \langle p \rangle$$

解释相应的测不准关系.

**解** 应用算符 $a$ 和$a^\dagger$,可以求出

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1) \tag{5.10.1}$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1) \tag{5.10.2}$$

和$\langle p \rangle = 0, \langle x \rangle = 0$.所以

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1)}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)}$$

于是

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}(2n+1) \tag{5.10.3}$$

所以基态满足测不准关系的最小值

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \tag{5.10.4}$$

**5.11** 最简单的分子晶体是由惰性气体形成的，如氖、氩、氪和氙.在这种分子晶体中离子之间的相互作用用 Lennard-Jones 势近似

$$V(r) = 4V_0\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right] \tag{5.11.1}$$

惰性气体的 $V_0$ 和 $\sigma$ 值列于表 5-1

表 5-1

| | Ne | Ar | Kr | Xe |
|---|---|---|---|---|
| $V_0$(eV) | 0.0031 | 0.0104 | 0.0140 | 0.0200 |
| $\sigma$(Å) | 2.74 | 3.40 | 3.65 | 3.98 |

近似地求出这种晶体单个粒子的基态能量.提示：$V(r)$最小值附近的离子可以当成谐振子处理.

**解答** 将最小值邻近的 $V(r)$近似表示成多项式的形式

$$V(r) \approx V_m + \frac{k}{2}(r - r_m)^2 + O[(r - r_m)^3] \tag{5.11.2}$$

这里 $V_m$ 是 $V(r_m)$的值，$r_m$ 是极小值点.所以

$$\left.\frac{dV(r)}{dr}\right|_{r=r_m} = 4V_0\left(-12\frac{\sigma^{12}}{r_m^{13}} + 6\frac{\sigma^6}{r_m^7}\right) = 0 \Rightarrow r_m = 2^{1/6}\sigma \tag{5.11.3}$$

这样，$V(r_m) = -V_0$，同样

$$k = \left.\frac{d^2V(r)}{dr^2}\right|_{r=r_m} = 4V_0\left(156\frac{\sigma^{12}}{r^{14}} - 42\frac{\sigma^6}{r^8}\right) = 36.2^{2/3}\frac{V_0}{\sigma^2} \tag{5.11.4}$$

现在，我们可以将晶体中一个离子的行为近似成谐振子的行为.势能为 $V(r) = U_0 + \left(\frac{k}{2}\right)(r - r_0)^2$ 的谐振子，其基态是

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} + U_0 = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} + U_0 \tag{5.11.5}$$

这里 $m$ 是离子的质量，所以

$$E_0 = V_m + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{3\hbar\cdot 2^{1/3}}{\sigma}\sqrt{\frac{V_0}{m}} - V_0 \tag{5.11.6}$$

## 补 充 习 题

**5.12** 证明 谐振子基态和第一激发态的本征函数有拐点，只要条件 $V(x)=E$ 得到满足，即

$$\frac{m\omega^2}{2}x^2 = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{5.12.1}$$

**5.13** 一粒子在势

$$V(x)=\begin{cases}\dfrac{m\omega^2}{2}x^2, & x>0\\ \infty, & x\leqslant 0\end{cases} \tag{5.13.1}$$

作用下运动，求它的本征能量和本征函数.

提示 当 $x>0$ 和 $x<0$ 分别解薛定谔方程是容易的，然后要求本征函数对 $x$ 的所有值连续.

**答案** 本征函数是 $\phi_n$($n$ 是奇数)，而 $\phi_n$ 是谐振子的本征函数. 本征能量是 $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$.

**5.14** 考虑各向同性三维谐振子，(a)用分离变量法求系统的本征态，(b)求能量本征值并确定能级简并度.

**答案** (a) $\psi(x,y,z)=\frac{1}{(\pi\lambda)^{3/2}}\frac{\mathrm{H}_{n_1}(x)\mathrm{H}_{n_2}(y)\mathrm{H}_{n_3}(z)}{\sqrt{2^{(n_1+n_2+n_3)}n_1!\ n_2!\ n_3!}}\mathrm{e}^{-(x^2+y^2+z^2)/2\lambda^2}$;

(b) $g_n=\frac{(3-1+n)!}{n!\ (3-1)!}=\frac{(n+1)(n+2)}{2}$.

**5.15** 谐振子在 $t=0$ 时刻的波函数是

$$\psi(x,0)=\sqrt{2}A\phi_1+\frac{1}{\sqrt{2}}A\phi_2+A\phi_3 \tag{5.15.1}$$

这里 $\phi_n$ 是谐振子第 $n$ 态的定态本征函数，$A$ 是归一化常数，(a)计算常数 $A$，(b)对所有的 $t$ 求波函数 $\psi(x,t)$，(c)计算 $t=0$, $t=\pi/\omega$ 和 $t=2\pi/\omega$ 时刻的平均能量$\langle E\rangle$，(d)求 $t\geqslant 0$ 时的期望值$\langle x\rangle$和$\langle p\rangle$

**答案** (a) $A=\sqrt{\frac{2}{7}}$; (b) $\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{7}}\left(\sqrt{2}\phi_1\mathrm{e}^{-3i\omega t/2}+\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2\mathrm{e}^{-5i\omega t/2}+\phi_3\mathrm{e}^{-7i\omega t/2}\right)$;

(c) $\langle E\rangle|_{t=0}=\langle E\rangle|_{t=\frac{\pi}{\omega}}=\langle E\rangle|_{t=\frac{2\pi}{\omega}}=\frac{31}{14}\hbar\omega$; (d) $\langle x\rangle=0$, $\langle p\rangle=0$.

**5.16** 考虑各向同性两维谐振子，(a)写出谐振子的定态薛定谔方程，在直角坐标系下求解方程；(b)在极坐标下写出定态薛定谔方程，对基态求解方程，这个态是简并的吗?

**答案** (a) 薛定谔方程

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y)+\frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2)\psi(x,y)=E\psi(x,y) \tag{5.16.1}$$

$$\psi_{00}(x,y)=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left[-\frac{m\omega}{4}(x^2+y^2)\right] \tag{5.16.2}$$

(b) 薛定谔方程

$$\frac{1}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\psi(r,\theta)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi(r,\theta)}{\partial\theta^2}+\frac{m\omega^2}{2}r^2\psi(r,\theta)=E\psi(r,\theta) \tag{5.16.3}$$

$$\psi_{00}(r,\theta)=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{m\omega}{4}r^2\right) \tag{5.16.4}$$

这个态不是简并的(基态).

**5.17** 对一维谐振子计算矩阵元$\langle n|x^2|m\rangle$和$\langle n|p^2|m\rangle$.

**答案** $$\langle n|x^2|m\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}\begin{cases}\sqrt{m(m-1)}, & n=m-2\\ (2m+1), & n=m\\ \sqrt{(m+1)(m+2)}, & n=m+2\\ 0, & \text{其余}\end{cases}$$

$$\langle n|p^2|m\rangle=-\frac{m\hbar\omega}{2}\begin{cases}\sqrt{m(m-1)}, & n=m-2\\ -(2m+1), & n=m\\ \sqrt{(m+1)(m+2)}, & n=m+2\\ 0, & \text{其余}\end{cases}$$

**5.18** 对一维谐振子计算矩阵元$\langle n|px|m\rangle$.

**答案**

$$\langle n|px|m\rangle=\begin{cases}\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}, & m=n\\ \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sqrt{(n-1)n}, & m=n-2\\ \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sqrt{(n+2)(n+1)}, & m=n+2\end{cases}$$

**5.19** 对一维谐振子计算矩阵元$\langle n|x^3|m\rangle$和$\langle n|x^4|m\rangle$.

**答案**

$$\langle n|x^3|m\rangle=\begin{cases}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)}, & m=n+3\\ 3\left(\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}\right)^{3/2}, & m=n+1\\ 3\left(\frac{\hbar n}{2m\omega}\right)^{3/2}, & m=n-1\\ \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{n(n-1)(n-2)}, & m=n-3\end{cases}$$

$$\langle n|x^4|m\rangle=\begin{cases}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}, & m=n+4\\ 4\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2}n\sqrt{(n+1)(n+2)}, & m=n+2\\ 2\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2}(3n^2+2n+1), & m=n\\ (4n-2)\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2}\sqrt{(n-1)n}, & m=n-2\\ \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{2}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}, & m=n-4\end{cases}\tag{5.19.1}$$

# 第六章 角动量

## 6.1 导论

像在经典力学中一样,我们引入形如

$$L = r \times p \tag{6.1}$$

的量子角动量.在量子力学中,$L$、$r$ 和 $p$ 都是算符,在直角坐标系中表示为

$$L = (L_x, L_y, L_z), \quad p = (p_x, p_y, p_z), \quad r = (x, y, z) \tag{6.2}$$

这样

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial y}\right) \\ L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar\left(z\dfrac{\partial}{\partial x} - x\dfrac{\partial}{\partial z}\right) \\ L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}\right) \end{cases} \tag{6.3}$$

以及

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{6.4}$$

在直角坐标系中 $L_j(j=x, y, z)$之间的对易关系为

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \tag{6.5}$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \tag{6.6}$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \tag{6.7}$$

## 6.2 对易关系

应用 6.1 节中的对易关系,可以求出另外一些有用的对易关系

$$[L^2, L] = 0 \Rightarrow [L^2, L_z] = [L^2, L_x] = [L^2, L_y] = 0 \tag{6.8}$$

$$[L_i, r_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \tag{6.9}$$

$$[L_i, p_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} p_k \tag{6.10}$$

$$[L_i, p^2] = [L_i, r^2] = [L_i, r \cdot p] = 0 \tag{6.11}$$

这里

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & ijk \text{ 正循环排列} \\ -1, & ijk \text{ 逆循环排列} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

## 6.3 降算符和升算符

我们定义升算符为

$$L_+ = L_x + \mathrm{i}L_y \tag{6.12}$$

同样,降算符为

$$L_- = L_x - \mathrm{i}L_y \tag{6.13}$$

于是有

$$L_x = \frac{L_+ + L_-}{2}, \quad L_y = \frac{L_+ - L_-}{2\mathrm{i}} \tag{6.14}$$

$L_+$和 $L_-$都不是厄米算符,因为可以证明

$$L_+ = L_-^{\dagger} \tag{6.15}$$

况且还有

$$L^2 = L_z^2 + \frac{1}{2}(L_+ L_- + L_- L_+) \tag{6.16}$$

和

$$L_+ L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z \tag{6.17}$$

$$L_- L_+ = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z \tag{6.18}$$

这样,我们就有对易关系

$$[L^2, L_\pm] = 0 \tag{6.19}$$

$$[L_z, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm \tag{6.20}$$

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \tag{6.21}$$

算符 $L_+$和 $L_-$使我们能够仅用 $L^2$ 和 $L_z$ 的一个本征函数表示$L^2$ 和 $L_z$ 的所有本征函数.

## 6.4 角动量代数

算符 $L^2$ 和 $L_z$ 描述物理量,因此,它们必须是厄米算符.即

$$(L_i)^+ = L_i \Rightarrow (L^2)^+ = L^2 \tag{6.22}$$

可以证明 $L^2$ 和 $L_z$ 对易,$[L^2, L_z]=0$[参看问题6.2,(a)]这样,就有可能求出 $L^2$ 和 $L_z$ 两者的共同本征函数($|lm\rangle$),它们构成一组完备正交归一基

$$L^2 |lm\rangle = l(l+1)\hbar^2 |lm\rangle \tag{6.23}$$

$$L_z |lm\rangle = m\hbar |lm\rangle \tag{6.24}$$

将降算符和升算符作用于$|lm\rangle$给出

$$L_+ |lm\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\hbar |l, m+1\rangle = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar |l, m+1\rangle \tag{6.25}$$

$$L_- |lm\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\hbar |l, m-1\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hbar |l, m-1\rangle \tag{6.26}$$

注意,如果$|lm\rangle$是 $L^2$ 的具有本征值 $l(l+1)$的本征矢量,那么对固定的 $l$,$L_z$ 有$(2l+1)$个可能的本征值

$$m = -l, -l+1, \cdots, 0, \cdots, l-1, l \tag{6.27}$$

这样

$$L_+ | l, l\rangle = 0 \tag{6.28}$$

$$L_- | l, \quad l\rangle = 0 \tag{6.29}$$

基$|lm\rangle$是正交归一的,即

$$\langle l_1 m_1 | l_2 m_2\rangle = \delta_{l_1 l_2}\delta_{m_1 m_2} \tag{6.30}$$

这组基称为正交归一基,正交归一基的完备性关系是

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} |lm\rangle\langle lm| = 1 \tag{6.31}$$

## 6.5 微分表示

本征向量和本征值用球坐标表示常常是非常方便的.

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \quad y = r\sin\theta\sin\phi, \quad z = r\cos\theta \tag{6.32}$$

角动量算符用球坐标表示是

$$\begin{cases} L_x = i\hbar\left(\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\cos\phi}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_y = i\hbar\left(-\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\sin\phi}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi} \end{cases} \tag{6.33}$$

上式给出

$$L^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{6.34}$$

$$L_+ = \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{6.35}$$

$$L_- = \hbar e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{6.36}$$

这样,$L^2$ 和 $L_z$ 的本征矢量就是仅依赖角 $\theta$ 和 $\phi$ 的函数.因此,我们可以将波函数表示为

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi) \tag{6.37}$$

对有心势 $V(\boldsymbol{r}) = V(r)$,我们发现 $Y_l^m(\theta, \phi)$是球谐函数,这里

$$|lm\rangle = Y_l^m(\theta, \phi) \tag{6.38}$$

当 $m>0$ 时,$Y_l^m(\theta,\phi)$的代数表示为

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{6.39}$$

当 $m<0$ 时

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{|m|}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+m)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{6.40}$$

$P_l^m(x)$是连带勒让德函数,定义为

$$P_l^m(x) = \sqrt{(1-x^2)^m}\,\frac{d^m}{dx^m}P_l(x) \tag{6.41}$$

这里 $P_l(x)$是勒让德多项式

$$P_l(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(1-x^2)^l \tag{6.42}$$

注意,除符号可以变化外,$Y_l^m(\theta,\phi)$是惟一定义的,球谐函数,连带勒让德函数,勒让德多项式在数学附录中有详细的介绍.

## 6.6　角动量的矩阵表示

在第四章中曾经说过,一个算符可以用矩阵形式表示.这种表示依赖于我们选择的基矢(本征矢量).对角动量算符,我们通常使用标准基$|lm\rangle$,于是代表算符 $A$ 的每个矩阵元$A_{ij}$满足

$$A_{ij} = \langle li \mid A \mid lj\rangle \tag{6.43}$$

这样,对每个 $l$=常数,对 $L^2$、$L_x$、$L_y$ 和$L_z$,我们都可以写出一个$(2l+1)\times(2l+1)$矩阵,即

$$(L^2)_{ij} = \langle li \mid L^2 \mid lj\rangle = l(l+1)\hbar^2\delta_{ij} \tag{6.44}$$

$$(L_z)_{ij} = \langle li \mid L_z \mid lj\rangle = j\hbar\delta_{ij} \tag{6.45}$$

$$(L_x)_{ij} = \langle li \mid L_x \mid lj\rangle = \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\delta_{i,j+1} + \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\delta_{i,j-1}\right] \tag{6.46}$$

$$(L_y)_{ij} = \langle li \mid L_y \mid lj\rangle = \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\delta_{i,j+1} - \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\delta_{i,j-1}\right] \tag{6.47}$$

例如 $l=1$，我们有

$$\begin{array}{c} \qquad\qquad |11\rangle \quad |10\rangle \quad |1-1\rangle \\ L^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{array}{l}|11\rangle\\ |10\rangle\\ |1-1\rangle\end{array}\end{array} \tag{6.48}$$

和

$$\begin{array}{c} \qquad\qquad |11\rangle \quad |10\rangle \quad |1-1\rangle \\ L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{array}{l}|11\rangle\\ |10\rangle\\ |1-1\rangle\end{array}\end{array}, \quad \begin{array}{c} \qquad\qquad |11\rangle \quad |10\rangle \quad |1-1\rangle \\ L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix}\begin{array}{l}|11\rangle\\ |10\rangle\\ |1-1\rangle\end{array}\end{array}$$

$$\begin{array}{c} \qquad\qquad |11\rangle \quad |10\rangle \quad |1-1\rangle \\ L_z = \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{array}{l}|11\rangle\\ |10\rangle\\ |1-1\rangle\end{array}\end{array} \tag{6.49}$$

### 6.7 球对称势

根据经典力学我们知道，当一个球对称势作用于一个粒子，其角动量是运动常量.在量子力学中，这意味着角动量算符 $L^2$ 和哈密顿量

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \tag{6.50}$$

对易，这里角动量对哈密顿量的依赖关系仅以 $L^2$ 的形式出现.这样我们可以将波函数分成两部分.角动量部分仅依赖于 $\theta$ 和 $\varphi$，而径向部分仅依赖于 $r$（参看问题 6.16 和 6.18）.

### 6.8 角动量和转动

令 $|\psi\rangle$ 是系统在某确定坐标系 $O$ 中的态矢量，要在另一个坐标系 $O'$ 中表示该态矢量，我们定义转动算符 $U_R$.这样，$O'$ 中的态矢量就由

$$|\psi'\rangle = U_R|\psi\rangle \tag{6.51}$$

给出，坐标系 $O'$ 可用旋转坐标系 $O'$ 的方法得到，而将坐标系 $O$ 绕 $\hat{n}$ 方向的轴线旋转角度 $\theta$.于是 $U_R$ 由

$$U_R(\theta, \hat{n}) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot \boldsymbol{L}\right) \tag{6.52}$$

这里 $\boldsymbol{L}$ 是角动量算符，称 $\boldsymbol{L}$ 为转动生成算符，由定义可以断定

$$\langle\psi'| = \langle\psi|U_R^\dagger \tag{6.53}$$

注意，要得到 $U_R$，我们通常应用无限小转动算符

$$U_R(\mathrm{d}\theta, \hat{n}) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\theta \boldsymbol{L}\cdot\hat{n} \tag{6.54}$$

注意还有

$$U_R(2\pi, \hat{n}) = U_R(0, \hat{n}) = 1 \tag{6.55}$$

$U_R$ 不仅对态矢量，对其算符或可观测量都可用作转动算符.这样，坐标系 $O$ 中的一个可观测量 $A$ 变换成坐标系 $O'$ 中的 $A'$，只需要

$$A' = U_R A U_R^\dagger \tag{6.56}$$

或同样地

$$A = U_R^\dagger A' U_R \tag{6.57}$$

## 例 题 解 答

**6.1** 利用角动量定义，$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，证明如下的对易关系

(a) $[L_i, r_j] = \mathrm{i}\hbar\sum_k \varepsilon_{ijk} r_k$；(b) $[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\sum_k \varepsilon_{ijk} L_k\ (i, j, k = x, y, z)$.注意，如果 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是矢量算符，矢量算符 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ 的第 $k$ 个分量是

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_k = \sum_{ij}\varepsilon_{ijk} A_i B_j \tag{6.1.1}$$

再利用恒等式

$$\sum_k \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{mnk} = \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm}$$

**解** (a)利用定义 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$,我们得到 $L_i = \sum_{kl}\varepsilon_{kli} r_k p_l$;于是有

$$[L_i,\ r_j] = \sum_{kl}\varepsilon_{kli}[r_k p_l,\ r_j] = \sum_{kl}\varepsilon_{kli}(r_k[p_l,\ r_j] + [r_k,\ r_j]p_l) \tag{6.1.2}$$

利用对易关系 $[r_k,\ r_j]=0$ 和 $[p_l,\ r_j] = -i\hbar\delta_{lj}$,这里

$$\delta_{lj} = \begin{cases} 1, & l = j \\ 0, & 其他 \end{cases} \tag{6.1.3}$$

我们得到

$$[L_i,\ r_j] = \sum_{kl}\varepsilon_{kli}(-i\hbar)\delta_{lj} r_k = -i\hbar\sum_k \varepsilon_{kji} r_k = -i\hbar\sum_k \varepsilon_{ikj} r_k = i\hbar\sum_k \varepsilon_{ijk} r_k \tag{6.1.4}$$

(b) 我们将对易关系 $[L_i,\ L_j] = i\hbar\sum_k \varepsilon_{ijk} L_k$ 分解成如下的三个对易关系:$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$,$[L_y,\ L_z] = i\hbar L_x$,$[L_z,\ L_x] = i\hbar L_y$,注意

$$L_x = (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_x = r_y p_z - r_z p_y,\ L_y = (\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_y = r_z p_x - r_x p_z \tag{6.1.5}$$

这样

$$\begin{aligned}[L_x,\ L_y] &= [r_y p_z - r_z p_y,\ r_z p_x - r_x p_z] \\ &= [r_y p_z,\ r_z p_x] - [r_y p_z,\ r_x p_z] - [r_z p_y,\ r_z p_x] + [r_z p_y,\ r_x p_z]\end{aligned} \tag{6.1.6}$$

我们分别计算每一个部分

$$\begin{aligned}[r_y p_z,\ r_z p_x] &= r_y[p_z,\ r_z p_x] + [r_y,\ r_z p_x]p_z \\ &= r_y(r_z[p_z,\ p_x] + [p_z,\ r_z]p_x) + (r_z[r_y,\ p_x] + [r_y,\ r_z]p_x)p_z\end{aligned} \tag{6.1.7}$$

现在,利用已知的关系

$$[p_z,\ p_x] = 0,\quad [p_z,\ r_z] = -i\hbar,\quad [r_y,\ p_x] = 0,\quad [r_y,\ r_z] = 0 \tag{6.1.8}$$

我们得到 $[r_y p_z, r_z p_x] = -i\hbar r_y p_x$.同样

$$\begin{aligned}[r_y p_z,\ r_x p_z] &= r_y[p_z, r_x p_z] + [r_y,\ r_x p_z]p_z \\ &= r_y(r_x[p_z,\ p_z] + [p_z,\ r_x]p_z) + ([r_y,\ r_x]p_z + r_x[r_y,\ p_z])p_z = 0\end{aligned} \tag{6.1.9}$$

和

$$\begin{aligned}[r_z p_y,\ r_z p_x] &= r_z[p_y, r_z p_x] + [r_z,\ r_z p_x]p_y \\ &= r_z([p_y,\ r_z]p_x + r_z[p_y,\ p_x]) + ([r_z,\ r_z]p_x + r_z[r_z,\ p_x])p_y = 0\end{aligned} \tag{6.1.10}$$

以及

$$\begin{aligned}[r_z p_y,\ r_x p_z] &= r_z[p_y, r_x p_z] + [r_z,\ r_x p_z]p_y \\ &= r_z([p_y,\ r_x]p_z + r_x[p_y,\ p_z]) + ([r_z,\ r_x]p_z + r_x[r_z,\ p_z])p_y = i\hbar r_x p_y\end{aligned} \tag{6.1.11}$$

于是,我们得到

$$[L_x,\ L_y] = i\hbar(r_x p_y - r_y p_x) = i\hbar(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_z = i\hbar L_z \tag{6.1.12}$$

我们将另外两个关系留给读者证明.

**6.2** 对于角动量算符,证明如下关系:(a) $[L^2,\ L_z] = 0$; (b) $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} = i\hbar\boldsymbol{L}$.

**证** (a)算符 $L^2$ 可以写成 $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$,所以

$$[L^2,\ L_z] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2,\ L_z] = [L_x^2,\ L_z] + [L_y^2,\ L_z] + [L_z^2,\ L_z] \tag{6.2.1}$$

我们分别计算每个部分:

$$[L_x^2,\ L_z] = L_x[L_x,\ L_z] + [L_x,\ L_z]L_x \tag{6.2.2}$$

在问题 6.1,我们曾经证明 $[L_x,\ L_z] = -[L_z,\ L_x] = -i\hbar L_y$.因此

$$[L_x^2, L_z] = -i\hbar(L_xL_y + L_yL_x) \tag{6.2.3}$$

同样，利用对易关系$[L_y, L_z]=i\hbar L_x$，我们有

$$[L_y^2, L_z] = L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y = i\hbar(L_yL_x + L_xL_y) \tag{6.2.4}$$

因为 $L_z$ 和自己对易，$[L_z^2, L_z]=0$ 我们得到

$$[L^2, L_z] = -i\hbar(L_xL_y + L_yL_x) + i\hbar(L_yL_x + L_xL_y) = 0 \tag{6.2.5}$$

(b) 我们将分别计算 $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}$ 的分量

$$\begin{cases}(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})_x = L_yL_z - L_zL_y = [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ (\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})_y = L_zL_x - L_xL_z = [L_z, L_x] = i\hbar L_y \\ (\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})_z = L_xL_y - L_yL_x = [L_x, L_y] = i\hbar L_z\end{cases} \tag{6.2.6}$$

这样，汇总三个分量，我们得到：$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}=i\hbar\boldsymbol{L}$.

**6.3** 考虑两个粒子的体系，每个粒子都有自己的角动量 $\boldsymbol{L}_1$ 和 $\boldsymbol{L}_2$，证明：$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2$ 是一个角动量算符，换句话说，证明 $\boldsymbol{L}$ 满足问题 6.2(b)中的关系.

**证明**　因为 $\boldsymbol{L}_1$ 和 $\boldsymbol{L}_2$ 两者都是角动量算符，对其和 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2$，我们有

$$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2)\times(\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2) = (\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_1) + (\boldsymbol{L}_2\times\boldsymbol{L}_2) + (\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2) + (\boldsymbol{L}_2\times\boldsymbol{L}_1) \tag{6.3.1}$$

在问题 6.2 中，我们看到，如果 $\boldsymbol{L}$ 是角动量算符，那么 $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}=i\hbar\boldsymbol{L}$，于是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} &= i\hbar\boldsymbol{L}_1 + i\hbar\boldsymbol{L}_2 + (\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2) + (\boldsymbol{L}_2\times\boldsymbol{L}_1) = i\hbar(\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2) + (\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2) + (\boldsymbol{L}_2\times\boldsymbol{L}_1) \\ &= i\hbar\boldsymbol{L} + (\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2) + (\boldsymbol{L}_2\times\boldsymbol{L}_1)\end{aligned} \tag{6.3.2}$$

现在，我们计算 $\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2$ 一项

$$\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2 = (L_{1y}L_{2z} - L_{1z}L_{2y})\hat{x} + (L_{1z}L_{2x} - L_{1x}L_{2z})\hat{y} + (L_{1x}L_{2y} - L_{1y}L_{2x})\hat{z} \tag{6.3.3}$$

同样

$$\boldsymbol{L}_2\times\boldsymbol{L}_1 = (L_{2y}L_{1z} - L_{2z}L_{1y})\hat{x} + (L_{2z}L_{1x} - L_{2x}L_{1z})\hat{y} + (L_{2x}L_{1y} - L_{2y}L_{1x})\hat{z} \tag{6.3.4}$$

因为 $\boldsymbol{L}_1$ 和 $\boldsymbol{L}_2$ 是不同的算符，它们的分量对易，所以我们有

$$(\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2) + (\boldsymbol{L}_2\times\boldsymbol{L}_1) = 0 \tag{6.3.5}$$

于是，最后

$$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{L}_2+\boldsymbol{L}_1)\times(\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2) = i\hbar(\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2) = i\hbar\boldsymbol{L} \tag{6.3.6}$$

**6.4** 考虑下面的关系

$$L_+ = L_x + iL_y,\ L_- = L_x - iL_y \tag{6.4.1}$$

$$L_+|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,|l, m+1\rangle \tag{6.4.2}$$

$$L_-|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,|l, m-1\rangle \tag{6.4.3}$$

$$L_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle \tag{6.4.4}$$

$$L^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle \tag{6.4.5}$$

考虑 $l=1$ 的系统，以 $L_z$ 和$L^2$ 共同本征矢为基矢，求 $L_x$、$L_y$、$L_z$ 和$L^2$ 的矩阵表示.

**解**　首先，我们注意到因为 $L_x$、$L_y$、$L_z$ 和$L^2$ 是厄米算符，作为矩阵表示，对每个矩阵元 $a_{ij}$，我们都有 $a_{ij}=a_{ji}^*$. 对于角动量 $l=1$ 的体系，$L_z$ 的本征矢量

$$\begin{cases}|1\rangle\ \text{相应于}\ l=1,\ m=1 \\ |0\rangle\ \text{相应于}\ l=1, m=0 \\ |-1\rangle\ \text{相应于}\ l=1, m=-1\end{cases} \tag{6.4.6}$$

要求出 $l$ 的矩阵表示,我们需要计算如下的关系:

$$\begin{cases} L_x\,|1\rangle = \dfrac{1}{2}(L_+ + L_-)\,|1\rangle = \dfrac{1}{2}L_-\,|1\rangle = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}\,|0\rangle \\ L_x\,|0\rangle = \dfrac{1}{2}(L_+ + L_-)\,|0\rangle = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle) \\ L_x\,|-1\rangle = \dfrac{1}{2}(L_+ + L_-)\,|-1\rangle = \dfrac{1}{2}L_+\,|-1\rangle = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}\,|0\rangle \end{cases} \tag{6.4.7}$$

如果选择标准基

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \tag{6.4.8}$$

$L_x$ 的矩阵表示是

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\1 & 0 & 1\\0 & 1 & 0\end{pmatrix} \tag{6.4.9}$$

同样,对 $L_y$ 我们有

$$\begin{cases} L_y\,|1\rangle = \dfrac{1}{2i}(L_+ - L_-)\,|1\rangle = \dfrac{i\hbar}{\sqrt{2}}\,|0\rangle \\ L_y\,|0\rangle = \dfrac{1}{2i}(L_+ - L_-)\,|0\rangle = \dfrac{i\hbar}{\sqrt{2}}(|-1\rangle - |1\rangle) \\ L_y\,|-1\rangle = \dfrac{1}{2i}(L_+ - L_-)\,|-1\rangle = -\dfrac{i\hbar}{\sqrt{2}}\,|0\rangle \end{cases} \tag{6.4.10}$$

所以

$$L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\i & 0 & -i\\0 & i & 0\end{pmatrix} \tag{6.4.11}$$

同样,对 $L_z$ 我们有 $L_z|1\rangle = \hbar|1\rangle$, $L_z|0\rangle = 0$ 以及 $L_z|-1\rangle = -\hbar|-1\rangle$;于是

$$L_z = \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & -1\end{pmatrix} \tag{6.4.12}$$

对 $L^2$,我们有 $L^2|1\rangle = 2\hbar^2|1\rangle$, $L^2|0\rangle = 2\hbar^2|0\rangle$和 $L^2|-1\rangle = 2\hbar^2|-1\rangle$; 于是

$$L^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{6.4.13}$$

**6.5　体系具有角动量 1 且处于态$\dfrac{1}{\sqrt{14}}\begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}$, $L_x$ 测量结果等于零的概率是多大?**

**解**　首先我们求出当 $l=1$ 时用 $L_z$ 的基表示的 $L_x$ 的本征矢量,即我们想求出

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\1 & 0 & 1\\0 & 1 & 0\end{pmatrix} \tag{6.5.1}$$

的本征矢量和本征值.假设 $L_x$ 的本征值是 $\hbar\lambda/\sqrt{2}$，$L_x$ 的久期方程是

$$\det\begin{pmatrix}-\lambda & 1 & 0\\ 1 & -\lambda & 1\\ 0 & 1 & -\lambda\end{pmatrix} = -\lambda(\lambda^2-1)+\lambda = 2\lambda-\lambda^3 = 0 \tag{6.5.2}$$

所以,$\lambda=0\pm\sqrt{2}$,于是 $L_x$ 的本征值是 $\pm\hbar$ 或 0,相应于本征值 $\hbar$ 的本征矢量是

$$|1\rangle_c = \begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} = a|1\rangle - b|0\rangle + c|-1\rangle \tag{6.5.3}$$

这里$|a|^2+|b|^2+|c|^2=1$ 是归一化条件.所以

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} \tag{6.5.4}$$

或

$$\text{I}\ b-\sqrt{2}a,\ \text{II}\ a+c=\sqrt{2}(a+b),\ \text{III}\ b=\sqrt{2}c \tag{6.5.5}$$

从(6.5.5 Ⅰ)和(6.5.5Ⅲ)我们得到 $b=\sqrt{2}a=\sqrt{2}c$,这样,利用归一化条件我们有

$$a^2+2a^2+a^2=1\ \Rightarrow a=\frac{1}{2} \tag{6.5.6}$$

所以本征矢量$|1\rangle_x$ 是

$$|1\rangle_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(|1\rangle+\sqrt{2}|0\rangle+|-1\rangle) \tag{6.5.7}$$

同样,相应于本征值零的本征矢量是

$$|0\rangle_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} = a|1\rangle+b|0\rangle+c|-1\rangle \tag{6.5.8}$$

这里 $a$、$b$ 和$c$ 满足归一化条件和

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} = 0 \tag{6.5.9}$$

或

$$\text{I}\ b=0,\quad \text{II}\ a+c=0 \tag{6.5.10}$$

因此,$a^2+0+a^2=1\Rightarrow a=1/\sqrt{2}$.最后,本征矢量$|0\rangle_x$ 是

$$|0\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle-|-1\rangle) \tag{6.5.11}$$

以及与本征值$-\hbar$ 对应的本征矢量是

$$|-1\rangle_x = \begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} = a|1\rangle+b|0\rangle+c|-1\rangle \tag{6.5.12}$$

这里 $a$、$b$ 和 $c$ 满足归一化条件，和

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=-\hbar\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix} \tag{6.5.13}$$

或

$$\text{I } b=-\sqrt{2}a,\quad \text{II } a+c=-\sqrt{2}b,\quad \text{III } b=-\sqrt{2}c \tag{6.5.14}$$

于是，$b=-\sqrt{2}a=-\sqrt{2}c$；利用归一化条件我们得到 $a^2+2a^2+a^2=1\Rightarrow a=1/2$，所以

$$|-1\rangle_x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}(|1\rangle-\sqrt{2}|0\rangle+|-1\rangle) \tag{6.5.15}$$

于是，我们可以写出

$$|\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{14}}\begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{14}}(|1\rangle+2|0\rangle+3|-1\rangle) \tag{6.5.16}$$

用 $L_x$ 的本征矢量为基，我们有

$$|\alpha\rangle_x={}_x\langle 1|\alpha\rangle|1\rangle_x+{}_x\langle 0|\alpha\rangle|0\rangle_x+{}_x\langle -1|\alpha\rangle|-1\rangle_x \tag{6.5.17}$$

我们分别计算诸项

$${}_x\langle 1|\alpha\rangle=\frac{1}{2\sqrt{14}}(1+2\sqrt{2}+3)=\frac{2+\sqrt{2}}{\sqrt{14}} \tag{6.5.18}$$

$${}_x\langle 0|\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{28}}(1-3)=-\frac{1}{\sqrt{7}} \tag{6.5.19}$$

和

$${}_x\langle -1|\alpha\rangle=\frac{1}{2\sqrt{14}}(1-2\sqrt{2}+3)=\frac{2-\sqrt{2}}{\sqrt{14}} \tag{6.5.20}$$

所以，测量 $L_x$ 结果为零的概率是

$$p_x(0)=|{}_x\langle 0|\alpha\rangle|^2=\frac{1}{7} \tag{6.5.21}$$

**6.6　将算符 $L_+\equiv L_x+\mathrm{i}L_y$ 和 $L_-\equiv L_x-\mathrm{i}L_y$ 作用于 $L^2$ 和 $L_z$ 的本征态（$|lm\rangle$）并解释结果的物理含义．按照步骤：(a)求出 $L_+$ 的厄米共轭．(b)计算 $L_+|lm\rangle$ 和 $L_-|lm\rangle$ 的模．(c)对于态 $L_+|lm\rangle$ 和 $L_-|lm\rangle$ 计算 $L^2$ 和 $L_z$ 的本征值．**

**解答**　(a)$L_+$ 的厄米共轭是 $L_+^\dagger=L_x^\dagger-\mathrm{i}L_y^\dagger$，因为 $L_x^\dagger=L_x$ 和 $L_y^\dagger=L_y$ 我们有 $L_+=L_-$，

(b) $L_+|lm\rangle$ 的模是

$$\|L_+|lm\rangle\|^2=(L_+|lm\rangle)^\dagger(L_+|lm\rangle)=\langle lm|(L_+^\dagger L_+)|lm\rangle=\langle lm|(L_-L_+)|lm\rangle \tag{6.6.1}$$

我们看到

$$\begin{aligned}L_-L_+&=(L_x-\mathrm{i}L_y)(L_x+\mathrm{i}L_y)=L_x^2+L_y^2-\mathrm{i}L_yL_x+\mathrm{i}L_xL_y=L_x^2+L_y^2+\mathrm{i}[L_x,L_y]\\&=L^2-L_z^2-\hbar L_z\end{aligned} \tag{6.6.2}$$

于是，代入 $L_-L_+$，我们得到

$$\begin{aligned}\|L_+|lm\rangle\|^2&=\langle lm|(L_-L_+)|lm\rangle=\langle lm|(L^2-L_z^2-\hbar L_z)|lm\rangle\\&=\hbar^2[l(l+1)-m^2-m]=\hbar^2[l(l+1)-m(m+1)]\end{aligned} \tag{6.6.3}$$

$L_-|lm\rangle$的模方是$\| L_-|lm\rangle \|^2=\langle lm|L_+L_-|lm\rangle$，又有

$$L_+L_- = (L_x+\mathrm{i}L_y)(L_x-\mathrm{i}L_y) = L_x^2+L_y^2+\mathrm{i}L_yL_x-\mathrm{i}L_xL_y = L^2-L_z^2-\mathrm{i}[L_x,L_y]$$
$$= L^2-L_z^2+\hbar L_z \tag{6.6.4}$$

所以，我们得到

$$\| L_-|lm\rangle \|^2 = \langle lm|(L^2-L_z^2+\hbar L_z)|lm\rangle = \hbar^2[l(l+1)-m^2+m]$$
$$= \hbar^2[l(l+1)-m(m-1)] \tag{6.6.5}$$

(c) 首先，我们考虑对易关系

$$[L^2, L_+] = [L^2, L_x+\mathrm{i}L_y] = [L^2, L_x]+\mathrm{i}[L^2, L_y] = 0 \tag{6.6.6}$$

和

$$[L^2,L_-] = [L^2, L_x-\mathrm{i}L_y] = [L^2, L_x]-\mathrm{i}[L^2, L_y] = 0 \tag{6.6.7}$$

这意味着$L^2L_+=L_+L^2$和$L^2L_-=L_-L^2$，对于$L_+|lm\rangle$和$L_-|lm\rangle L^2$的本征值是

$$\begin{cases} L^2(L_+|lm\rangle) = L_+(L^2|lm\rangle) = \hbar^2 l(l+1)L_+|lm\rangle \\ L^2(L_-|lm\rangle) = L_-(L^2|lm\rangle) = \hbar^2 l(l+1)L_-|lm\rangle \end{cases} \tag{6.6.8}$$

这就是说，$L_+|lm\rangle$和$L_-|lm\rangle$是$L^2$的属于本征值$\hbar^2l(l+1)$的本征态．在我们继续计算$L_z$的本征值以前，应注意到

$$[L_+, L_z] = [L_x+\mathrm{i}L_y, L_z] = [L_x, L_z]+\mathrm{i}[L_y, L_z] = -\mathrm{i}\hbar L_y-\hbar L_x = -\hbar L_+ \tag{6.6.9}$$

所以$L_+L_z-L_zL_+=-\hbar L_+$，$L_zL_+=L_+L_z+\hbar L_+$．同样地

$$[L_-, L_z] = [L_x-\mathrm{i}L_y, L_z] = [L_x, L_z]+\mathrm{i}[L_y, L_z] = -\mathrm{i}\hbar L_y+\hbar L_x = \hbar L_- \tag{6.6.10}$$

因此，$L_-L_z-L_zL_-=\hbar L_-$ and$L_zL_-=L_-L_z-\hbar L_-$．于是，我们可以计算

$$\begin{aligned} L_zL_+|lm\rangle &= (L_+L_z+\hbar L_+)|lm\rangle = L_+L_z|lm\rangle+\hbar L_+|lm\rangle \\ &= m\hbar L_+|lm\rangle+\hbar L_+|lm\rangle = (m+1)\hbar L_+|lm\rangle \end{aligned} \tag{6.6.11}$$

以及

$$\begin{aligned} L_zL_-|lm\rangle &= (L_-L_z-\hbar L_-)|lm\rangle = L_-L_z|lm\rangle-\hbar L_-|lm\rangle \\ &= m\hbar L_-|lm\rangle-\hbar L_-|lm\rangle = (m-1)\hbar L_-|lm\rangle \end{aligned} \tag{6.6.12}$$

我们看到$L_+|lm\rangle$和$L_-|lm\rangle$分别是$L_z$的属于本征值$m(m+1)\hbar$和$m(m-1)\hbar$的本征态．结果为

$$\begin{cases} \| L_+|lm\rangle \| = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)} \\ \| L_-|lm\rangle \| = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)} \end{cases} \tag{6.6.13}$$

$$\begin{cases} L^2(L_+|lm\rangle) = \hbar^2 l(l+1)(L_+|lm\rangle) \\ L^2(L_-|lm\rangle) = \hbar^2 l(l+1)(L_-|lm\rangle) \end{cases} \tag{6.6.14}$$

和

$$\begin{cases} L_z(L_+|lm\rangle) = \hbar(m+1)(L_+|lm\rangle) \\ L_z(L_+|lm\rangle) = \hbar(m-1)(L_-|lm\rangle) \end{cases} \tag{6.6.15}$$

从(6.6.14)，我们看到$L_+|lm\rangle$和$L_-|lm\rangle$正比于$|lm'\rangle$(注意$m'$和$m$不同)．从(6.6.15)，我们断定$L_+|lm\rangle$正比于$|l', m+1\rangle$而$L_-|lm\rangle$正比于$|l', m-1\rangle$；这样

$$L_+|lm\rangle \sim |l, m+1\rangle,\quad L_-|lm\rangle \sim |l, m-1\rangle \tag{6.6.16}$$

回想到$|l', m+1\rangle$和$L_-|lm\rangle$的模是1，因此，从(6.6.13)我们得到

$$L_+|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,|l, m+1\rangle \tag{6.6.17}$$

$$L_-|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,|l, m-1\rangle \tag{6.6.18}$$

于是,我们看到算符 $L_+$ 和 $L_-$ 容许我们在 $L^2$ 和 $L_z$ 的本征值之间"窜来窜去",还应注意的是 $L_+|l, l\rangle=0$ 和 $L_-|l, -l\rangle=0$.

**6.7** 在标准角动量基下计算表达式 $\langle lm|L_x^2|lm\rangle$ 和 $\langle lm|L_xL_y|lm\rangle$.

**解** 第一步,我们用 $L_+$ 和 $L_-$ 表示 $L_x$ 和 $L_y$

$$L_x=\frac{L_++L_-}{2} \text{ 和 } L_y=\frac{L_+-L_-}{2i} \tag{6.7.1}$$

记住

$$L_+|lm\rangle=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,|l, m+1\rangle \tag{6.7.2}$$

和

$$L_-|lm\rangle=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,|l, m-1\rangle \tag{6.7.3}$$

算符 $L_x^2$ 可以写成

$$L_x^2=\frac{1}{4}(L_+-L_-)^2=\frac{1}{4}(L_+^2-L_-^2+2L_+L_-+2L_-L_+) \tag{6.7.4}$$

$L_+^2$ 和 $L_-^2$ 两项对表达式 $\langle lm|L_x^2|lm\rangle$ 的确没有贡献,因为

$$\begin{cases}\langle lm|L_+^2|lm\rangle\sim\langle lm|l, m+2\rangle=0\\ \langle lm|L_-^2|lm\rangle\sim\langle lm|l, m-2\rangle=0\end{cases} \tag{6.7.5}$$

这样,要计算 $\langle lm|L_x^2|lm\rangle$,我们只要考虑 $L_-L_+$ 和 $L_+L_-$ 的贡献,即

$$\begin{aligned}\langle lm|L_x^2|lm\rangle&=\frac{1}{2}\langle lm|L_+L_-+L_-L_+)|lm\rangle\\
&=\frac{1}{2}[\langle lm|(L_+L_-)|lm\rangle+\langle lm|(L_-L_+)|lm\rangle]\\
&=\frac{\hbar}{2}\Big[\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\langle lm|L_+|l, m-1\rangle\\
&\quad+\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}(\langle lm|L_-|l, m+1\rangle)\Big]\\
&=\frac{\hbar^2}{2}\Big[\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\langle lm|lm\rangle\\
&\quad+\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\langle lm|lm\rangle\Big]\\
&=\frac{\hbar^2}{2}[l(l+1)-m(m-1)+l(l+1)-m(m+1)]\\
&=\hbar^2[l(l+1)-m^2]\end{aligned} \tag{6.7.6}$$

我们开始计算 $\langle lm|L_xL_y|lm\rangle$,利用 $L_+$ 和 $L_-$ 我们得到

$$L_xL_y=\frac{1}{4\mathrm{i}}(L_++L_-)(L_+-L_-)=\frac{1}{4\mathrm{i}}[L_+^2-L_-^2-L_+L_-+L_-L_+] \tag{6.7.7}$$

$L_+^2$ 和 $L_-^2$ 两项对 $\langle lm|L_xL_y|lm\rangle$ 也没有贡献;于是

$$\begin{aligned}\langle lm|(L_xL_y)|lm\rangle&=\frac{1}{4\mathrm{i}}[\langle lm|(L_+^2-L_-^2+L_-L_+-L_+L_-)|lm\rangle]\\
&=\frac{1}{4\mathrm{i}}[\langle lm|(L_-L_+-L_+L_-)|lm\rangle]\\
&=\frac{1}{4\mathrm{i}}[\langle lm|(L_-L_+)|lm\rangle-\langle lm|(L_+L_-)|lm\rangle]\\
&=\frac{\hbar}{4\mathrm{i}}\Big[\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\langle lm|L_-|l, m+1\rangle-\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\langle lm|L_+|l, m-1\rangle\Big]\\
&=\frac{\hbar^2}{4\mathrm{i}}\Big[\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\langle lm|lm\rangle\end{aligned}$$

$$-\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\langle lm \mid lm\rangle]=\frac{\mathrm{i}\hbar^2 m}{2} \qquad (6.7.8)$$

**6.8** 考虑粒子具有波函数

$$\psi(x,y,z)=N(x+y+z)\mathrm{e}^{-[(x^2+y^2+z^2)/\alpha^2]} \qquad (6.8.1)$$

这里 $N$ 是归一化常数，而 $\alpha$ 是一个参数.我们测量 $L^2$ 和 $L_z$.

求测量结果为如下值的概率(a) $L^2=2\hbar^2$, $L_z=0$;(b) $L^2=2\hbar^2$, $L_z=\hbar$;(c) $L^2=2\hbar^2$, $L_z=-\hbar$，利用已知的关系式

$$Y_1^1(\theta,\phi)=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi},\quad Y_1^0(\theta,\phi)=-\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_1^{-1}(\theta,\phi)=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \qquad (6.8.2)$$

**解** 首先我们用球坐标表示函数 $\psi(x,y,z)$

$$x=r\sin\theta\cos\phi,\quad y=r\sin\theta\sin\phi,\quad z=r\cos\theta \qquad (6.8.3)$$

这里 $r^2=x^2+y^2+z^2$,

$$\psi(r,\theta,\phi)=N[\sin\theta(\cos\phi+\sin\phi)+\cos\theta]r\mathrm{e}^{-r^2/\alpha^2} \qquad (6.8.4)$$

我们将 $\psi(r,\theta,\phi)$写成两个函数乘积的形式 $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)T(\theta,\phi)$,这里 $R(r)=Nr\mathrm{e}^{-r^2/\alpha^2}$,和

$$T(\theta,\phi)=\sum_{lm}a_{lm}Y_l^m(\theta,\phi)=\sin\theta\cos\phi+\sin\theta\sin\phi+\cos\theta \qquad (6.8.5)$$

系数由式

$$a_{lm}=\langle lm \mid T(\theta,\phi)\rangle=\int(Y_l^m)^* T(\theta,\phi)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \qquad (6.8.6)$$

确定,利用球谐函数的性质,我们可以证明

$$T(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left[\frac{1}{2}(Y_1^{-1}-Y_1^1)-\frac{1}{2\mathrm{i}}(Y_1^{-1}+Y_1^1)\right]+\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0$$
$$=\sqrt{\frac{2\pi}{3}}[(1+\mathrm{i})Y_1^{-1}-(1-\mathrm{i})Y_1^1+\sqrt{2}Y_1^0] \qquad (6.8.7)$$

为计算概率,我们必须将函数 $T(\theta,\phi)$归一化;我们用 $T'(\theta,\phi)=\beta T(\theta,\phi)$表示归一化函数,这里

$$\beta^2\int T^*(\theta,\phi)T(\theta,\phi)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi=\beta^2\frac{2\pi}{3}(2+2+2)=4\pi\beta^2=1 \qquad (6.8.8)$$

或 $\beta=1/\sqrt{4\pi}$,因此,我们有

$$T'(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{6}}[(1+\mathrm{i})Y_1^{-1}-(1-\mathrm{i})Y_1^1+\sqrt{2}Y_1^0] \qquad (6.8.9)$$

这样,各概率计算如下:

(a)当 $L^2=2\hbar^2$ 和 $L_z=0$,有

$$P=|\langle 1,0 \mid T'\rangle|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{2}\right|^2=\frac{1}{3} \qquad (6.8.10)$$

(b)当 $L^2=2\hbar^2$ 和 $L_z=\hbar$ 我们有

$$P=|\langle 1,1 \mid T'\rangle|^2=\left|-\frac{1-\mathrm{i}}{\sqrt{6}}\right|^2=\frac{1}{3} \qquad (6.8.11)$$

(c)当 $L^2=2\hbar^2$ 和 $L_z=-\hbar$ 我们有

$$P=|\langle 1,-1 \mid T'\rangle|^2=\left|\frac{1+\mathrm{i}}{\sqrt{6}}\right|^2=\frac{1}{3} \qquad (6.8.12)$$

**6.9** 对称陀螺,在随体运动的坐标系下,转动惯量为 $I_x=I_y$ 和 $I_z$,用哈密顿量

$$H = \frac{1}{2I_x}(L_x^2 + L_y^2) + \frac{1}{2I_z}L_z^2 \tag{6.9.1}$$

描述,注意转动惯量是参数而不是算符,$L_x$、$L_y$ 和 $L_z$ 是在随陀螺运动的坐标系下的角动量算符.(a) 计算哈密顿量的本征值和本征态;(b) 对于任何态,测量 $L_x + L_y + L_z$ 的期望值是多少? (c)陀螺在 $t=0$ 的态是 $|l=3,\ m=0\rangle$,在 $t=4\pi I_x/\hbar$ 测量 $L_x$,得到值为 $\hbar$ 的概率是多大?

**解** (a)第一步,我们将哈密顿量写为

$$H = \frac{1}{2I_x}(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) + \left(\frac{1}{2I_z} - \frac{1}{2I_x}\right)L_z^2 = \frac{1}{2I_x}L^2 + \left(\frac{1}{2I_z} - \frac{1}{2I_x}\right)L_z^2 \tag{6.9.2}$$

这里 $L$ 是总角动量,想到,如果 $A$ 是一个算符,它有本征值 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,n)$,则 $f(A)$(这里 $f(A)$是 $A$ 的函数)的本征值是 $f(\lambda_i)$,因此能量的本征值是

$$E_{lm} = \frac{\hbar^2}{2I_x}l(l+1) + \left(\frac{1}{2I_z} - \frac{1}{2I_x}\right)\hbar^2 m^2 \tag{6.9.3}$$

于是哈密顿量的本征态就 $L^2$ 和 $L_z$ 的本征态.即球谐函数 $Y_l^m(\theta,\phi)$具有本征能量 $E_{lm}$.

(b) 对陀螺测量 $L_x + L_y + L_z$,我们在本征态 $Y_l^m(\theta,\phi)$找到陀螺,即 $L_x + L_y + L_z$ 的测量给出结果

$$\langle Y_l^m(\theta,\phi) \mid (L_x + L_y + L_z) \mid Y_l^m(\theta,\phi)\rangle = \langle Y_l^m(\theta,\phi) \mid \left(\frac{L_+ + L_-}{2} + \frac{L_+ - L_-}{2i} + L_z\right) \mid Y_l^m(\theta,\phi)\rangle$$

$$= \langle Y_l^m(\theta,\ \phi) \mid L_z \mid Y_l^m(\theta,\ \phi)\rangle = \hbar m \tag{6.9.4}$$

(c) 陀螺在 $t=0$ 的态是 $\psi(t=0,\ \theta,\phi) = Y_3^0(\theta,\phi)$,这是哈密顿量的本征态.对这个态,$L_z$ 的测量给出 0 值,因为它是哈密顿量的本征态,陀螺将总是保持在这个态,所以测量得到 $\hbar$ 的概率为零.

**6.10** 球谐函数用

$$Y_l^m(\theta,\phi) = C_l^m P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{6.10.1}$$

定义,这里 $C_l^m$ 是归一化常数,$P_l^m(x)$是连带勒让德函数,定义为

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}}P_l(x) = P_l^{-m}(x) \tag{6.10.2}$$

计算 $m=0,\ \pm 1$ 的 $Y_l^m(\theta,\phi)$.

**解** 考虑到勒让德多项式 $P_1(x)=x$ 于是$\frac{d}{dx}(P_1(x))=1$.所以,依据(6.10.2)(参看数学附录)我们有

$$P'_1(x) = P_1^1(x) = \sqrt{1-x^2} \tag{6.10.3}$$

同样地,$P_1^0(x)=x$; 于是应用(6.10.1)我们得到

$$Y_1^1(\theta,\phi) = C_1^1 P_1^1(\cos\theta)e^{i\phi} = C_1^1\sin\theta e^{i\phi} \tag{6.10.4}$$

以及

$$Y_1^{-1}(\theta,\phi) = C_1^{-1}\sin\theta e^{-i\phi}, \quad Y_1^0(\theta,\ \phi) = C_1^0\cos\theta \tag{6.10.5}$$

利用归一化条件,我们得到

$$\int_0^{2\pi}d\phi\int_l^{\pi}(Y_1^m)^*(\theta,\phi)Y_l^m(\theta,\phi)\sin\theta d\theta = 1 \Rightarrow \int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}(C_1^0)^2\cos^2\theta d\theta = 1 \tag{6.10.6}$$

或 $-2\pi(C_1^0)^2\int_0^{\pi}\cos^2\theta d(\cos\theta)=1$,即 $C_1^0=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}$.同样

$$C_1^1 = C_1^{-1} = \left(\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta e^{i\phi}\sin\theta e^{-i\phi}\sin\theta d\theta\right)^{-2} = \left(2\pi\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta\right)^{-2} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \tag{6.10.7}$$

最后,我们有

$$Y_1^0(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_1^1(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi},\quad Y_1^{-1}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\phi} \tag{6.10.8}$$

**6.11** 求解本征值方程 $L^2Y(\theta,\phi)=\lambda\hbar^2Y(\theta,\phi)$，并求出 $L^2$ 的本征值.应用 $L^2$ 在球坐标中的表达式

$$L^2=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right] \tag{6.11.1}$$

**解** ☞　首先，我们将 $L^2$ 的表达式代入本征值方程，得到

$$\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]Y(\theta,\phi)=-\lambda Y(\theta,\phi) \tag{6.11.2}$$

我们用分离变量法求解该方程，于是我们将 $Y(\theta,\phi)=\Phi(\phi)\Theta(\theta)$代入并得到

$$\frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)=-\lambda\Phi(\phi)\Theta(\theta) \tag{6.11.3}$$

(6.11.3)两边除以$\dfrac{\Theta(\theta)\Phi(\phi)}{\sin^2\theta}$，我们得到

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta=0 \tag{6.11.4}$$

现在，我们有两项，第一项$\dfrac{1}{\Phi}\dfrac{d^2\Phi}{d\phi^2}$，仅是 $\phi$ 的函数，而第二项$\dfrac{\sin\theta}{\Theta}\dfrac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\dfrac{d\Theta}{d\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta$，仅是 $\theta$ 的函数，两部分之和为零，因此，每一项本身必须是常数，我们令

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=-m^2 \tag{6.11.5}$$

和

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\lambda\sin^2\theta=m^2 \tag{6.11.6}$$

方程(6.11.5)的解是

$$\Phi(\phi)=e^{im\phi} \tag{6.11.7}$$

要具备作为周期函数的资格，$\Phi(\phi)$必须满足条件 $\Phi(\phi+2\pi)=\Phi(\phi)$；即 $e^{2\pi im}=1$，这样 $m$ 必须是整数，$m=0,\ \pm1,\pm2,\cdots$.现在，(6.11.6)可以改用变数 $x=\cos\theta$ 表示，这里

$$\frac{d}{d\theta}=\frac{dx}{d\theta}\frac{d}{dx}=-\sin\theta\frac{d}{dx}=-\sqrt{1-x^2}\frac{d}{dx} \tag{6.11.8}$$

代入(6.11.6)，现在，我们有

$$\frac{1-x^2}{\Theta}\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right]+\lambda(1-x^2)-m^2=0 \tag{6.11.9}$$

我们重新安排(6.11.9)，以得到一般勒让德方程的形式

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta=0 \tag{6.11.10}$$

注意，在变换 $x\to -x$ 下，方程(6.11.10)不变，这意味着一般勒让德方程的解要么是关于 $x$ 对称的，要么是反对称的.当 $m^2=0$ 时，方程为

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right]+\lambda\Theta=0 \tag{6.11.11}$$

假设解可用幂级数表示，于是，设 $\Theta(x)=x^s\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_nx^n$，代入(6.11.11)得到

$$\sum_{n=0}^{\infty}((s+n+2)(s+n+1)a_{n+2}x^{s+n}-[(s+n)(s+n+1)-\lambda](a_nx^{s+n}))=0 \tag{6.11.12}$$

具体过程留给读者去证明.上式中每一项的系数必须为零,我们有

$$(s+n+2)(s+n+1)a_{n+2}=[(1+n)(s+n+1)-\lambda]a_n \tag{6.11.13}$$

或

$$a_{n+2}=\frac{(s+n)(s+n+1)-\lambda}{(s+n+2)(s+n+1)}a_n \tag{6.11.14}$$

函数 $\Theta(x)$在 $x=1(\theta=0)$是有界的,于是对 $\lambda$ 条件$(s+n)(s+n+1)-\lambda=0$ 必须成立.这就是说,$\lambda$ 必须具有$\lambda=l(l+1)$的形式.这里 $l$ 是整数,所以 $L^2$ 的本征值是 $\hbar^2 l(l+1)$、方程(6.11.11)的解,可以表示为

$$\Theta_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}(x^2-1)^l \tag{6.11.15}$$

同样地,(6.11.10)的一般解是

$$\Theta_l^m(x)=\frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^{(l+|m|)}}{\mathrm{d}x^{(l+|m|)}}(x^2-1)^l=(-1)^m(1-x^2)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}P_l(x) \tag{6.11.16}$$

**6.12** 考虑有心势场中的粒子,已知:$|lm\rangle$是 $L^2$ 和 $L_z$ 的本征态:

(a) 计算和式 $\Delta L_x^2+\Delta L_y^2$; (b) 对 $l$ 和 $m$ 的什么值,(a)中的和式为零.

**解** (a)测不准量 $\Delta L_x^2$ 和 $\Delta L_y^2$ 定义为

$$\Delta L_x^2=\langle L_x^2\rangle-\langle L_x\rangle^2,\quad \Delta L_y^2=\langle L_y^2\rangle-\langle L_y\rangle^2 \tag{6.12.1}$$

利用升算符 $L_+$ 和降算符 $L_-$ 我们写出 $L_x=\frac{L_++L_-}{2}$和 $L_y=\frac{L_+-L_-}{2i}$,所以我们有

$$L_x^2=\frac{1}{4}(L_+^2+L_-^2+L_+L_-+L_-L_+),\quad L_y^2=-\frac{1}{4}(L_+^2+L_-^2-L_+L_--L_-L_+) \tag{6.12.2}$$

于是

$$\begin{cases}\langle L_x\rangle=\langle lm\mid L_x\mid lm\rangle=\langle lm\mid\left(\frac{L_++L_-}{2}\right)\mid lm\rangle=0\\ \langle L_y\rangle=\langle lm\mid L_y\mid lm\rangle=\langle lm\mid\left(\frac{L_+-L_-}{2i}\right)\mid lm\rangle=0\end{cases} \tag{6.12.3}$$

因为

$$\begin{cases}L_+\mid lm\rangle=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\mid l,\ m+1\rangle\\ L_-\mid lm\rangle=\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\mid l,\ m-1\rangle\end{cases} \tag{6.12.4}$$

同样,我们可以计算

$$\begin{aligned}\langle L_x^2\rangle=\langle lm\mid L_x^2\mid lm\rangle&=\frac{1}{4}(\langle lm\mid(L_+^2+L_-^2+L_+L_-+L_-L_+)\mid lm\rangle)\\&=\frac{1}{4}(\langle lm\mid(L_+^2+L_-^2)\mid lm\rangle+\langle lm\mid(L_+L_-+L_-L_+)\mid lm\rangle)\end{aligned} \tag{6.12.5}$$

根据升降算符的性质,我们有

$$L_+^2\mid lm\rangle\sim\mid l,\ m+2\rangle,\quad L_-^2\mid lm\rangle\sim\mid l,\ m-2\rangle \tag{6.12.6}$$

我们还有

$$L_+L_-\mid lm\rangle=L_+(\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\mid l,\ m-1\rangle)=\hbar^2[l(l+1)-m(m-1)]\mid lm\rangle \tag{6.12.7}$$

和

$$L_-L_+\mid lm\rangle=L_-(\hbar\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\mid l,\ m+1\rangle)=\hbar^2[l(l+1)-m(m+1)]\mid lm\rangle \tag{6.12.8}$$

这样,我们得到

$$\langle L_x^2\rangle = \hbar^2[l(l+1)-m(m-1)+l(l+1)-m(m+1)] = 2\hbar^2[l(l+1)-m^2] \tag{6.12.9}$$

同样

$$\langle L_y^2\rangle = \langle L_x^2\rangle = 2\hbar^2[l(l+1)-m^2] \tag{6.12.10}$$

最后,我们有

$$\Delta L_x^2+\Delta L_y^2 = \langle L_x^2\rangle-\langle L_x\rangle^2+\langle L_y^2\rangle-\langle L_y\rangle^2 = 4\hbar^2[l(l+1)-m^2] \tag{6.12.11}$$

(b) 利用(a)的结果,我们看到,当 $l(l+1)-m^2=0$ 时,$\Delta L_x^2+\Delta L_y^2=0$;即 $m^2=l(l+1)$,利用 $m$ 和 $l$ 必须是整数的事实,我们可以断定只有当 $l=m=0$ 时,这一条件才能满足.

**6.13** 考虑系统具有态函数

$$\psi(r,\ t=0) = N\xi\exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right) \tag{6.13.1}$$

这里 $\xi=x+iy$;$N$ 是归一化常数,$r_0$ 是给定的参数,还已知 $L^2$ 和 $L_z$ 的本征函数是球谐函数

$$Y_1^1(x,\ y,\ z) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{\xi}{r},\quad Y_1^0(x,\ y,\ z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r},\quad Y_1^{-1}(x,\ y,\ z) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{\xi^*}{r} \tag{6.13.2}$$

(a) 测量 $L^2$ 和 $L_z$ 得到的值是多少?求每个测量结果的概率.(b)写出 $L^2$ 和 $L_x$ 的三个相应于已知球谐函数的本征函数.(c)求 $L_x$ 的测量预期值,每个值的概率是多大?

**解** (a)考虑算符 $L^2$ 和 $L_z$,它们仅作用于波函数对角度 $\phi$ 和 $\theta$ 有依赖关系的部分,注意,我们可以将 $\psi$ 写为

$$\psi(r,\ t=0) = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Nr\exp\left(\frac{-r^2}{2r_0^2}\right)Y_1^1(x,\ y,\ z) \tag{6.13.3}$$

所以,我们看到,在 $L^2$ 和 $L_z$ 的测量中,可能值分别是 $2\hbar^2$ 和 $\hbar$ 的概率为百分之百.(因为 $L^2$ 和 $L_z$ 仅作用于 $Y_1^1(x,\ y,\ z)$,它是这两个算符属于这两本征值的本征函数.)

(b)考虑 $K'$系,其坐标轴 $x'$、$y'$和$z'$平行于原来坐标系$K$ 的$x$、$y$ 和$z$ 轴.在变换 $x'\to y,\ y'\to z,z'\to x$ 下,$K'$系中的算符$L_{z'}$和$K$ 系中的$L_x$ 相同,这样 $L_{z'}$的本征函数和$L_x$ 的本征函数相同.$L_{z'}$的本征函数是

$$(Y_1^1(x',y',z'))_{L_{z'}} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{\xi'}{r'} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x'+iy'}{\sqrt{x'^2+y'^2+z'^2}} \tag{6.13.4}$$

因而 $L_x$ 的本征函数是

$$(Y_1^1(x,y,z))_{L_x} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y+iz}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y+iz}{r} \tag{6.13.5}$$

因为 $L^2$ 和 $L_z$ 与$L_x$ 对易,$(Y_1^1)_{L_x}$是$L_x$ 的一个本征函数;它也是 $L^2$ 的一个本征函数.

$$(Y_1^0)_{L_x} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r},\ (Y_1^{-1})_{L_x} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y-iz}{r} \tag{6.13.6}$$

(c)紧接(a)和(b)的结果,我们用展开定理写出(参看第四章)

$$\psi(r,\ t=0) = Nr\exp\left(-\frac{r^2}{2r_0^2}\right)\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left((Y_1^0)_{L_x}+\frac{i}{\sqrt{2}}[(Y_1^{-1})_{L_x}+(Y_1^1)_{L_x}]\right) \tag{6.13.7}$$

仅考虑函数 $\psi$ 中是$L^2$ 和 $L_x$ 的本征函数的那一部分

$$P(x,\ y,\ z) = \alpha\left(({\rm Y}_1^0)_{L_z} + \frac{\rm i}{\sqrt{2}}[({\rm Y}_1^{-1})_{L_z} - ({\rm Y}_1^1)_{L_z}]\right) \quad (6.13.8)$$

这里 $\alpha$ 是归一化常数. $\langle p|p\rangle = \alpha^2\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)=1 \Rightarrow \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$,所以

$$P(x,\ y,\ z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(({\rm Y}_1^0)_{L_z} + \frac{\rm i}{\sqrt{2}}[({\rm Y}_1^{-1})_{L_z} - ({\rm Y}_1^1)_{L_z}]\right) \quad (6.13.9)$$

因此,测量 $L_z$ 和 $L^2$ 的预期值如下:对 $L^2 = 2\hbar^2$ 和 $L_z = 0$,概率是 $|\langle({\rm Y}_1^0)_{L_z}|P\rangle|^2 = \frac{1}{2}$;对 $L_2^2 = 2\hbar^2$ 和 $L_z = \hbar$,概率为 $|\langle({\rm Y}_1^1)_{L_z}|P\rangle|^2 = \frac{1}{4}$,最后对 $L^2 = 2\hbar^2$ 和 $L_z = -\hbar$,概率为 $|\langle({\rm Y}_1^1)_{L_z}|P\rangle|^2 = \frac{1}{4}$.

**6.14** 考虑无限深球形势阱

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant r \leqslant a \\ \infty, & a < r \end{cases} \quad (6.14.1)$$

中的粒子,(a)写出径向和角向微分方程,并求解角向方程;(b)计算:当 $l=0$ 时的能级和定态波函数.

**解答** (a)我们首先写出系统的哈密顿量

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \quad (6.14.2)$$

这里球坐标中 $\nabla^2$ 是

$$\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (6.14.3)$$

于是

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (6.14.4)$$

定态波函数 $\psi(r,\ \theta,\phi)$ 的微分方程是

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{L^2\psi}{2mr^2} + V(r)\psi = E\psi \quad (6.14.5)$$

显然 $[H,\ L^2]=0$;因而,我们将 $\psi$ 写成 $\psi(r,\ \theta,\ \phi) = R_{nl}(r){\rm Y}_l^m(\theta,\phi)$ 并得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{{\rm Y}_l^m(\theta,\ \phi)}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[rR_{nl}(r)] + \frac{R_{nl}(r)L^2{\rm Y}_l^m(\theta,\ \phi)}{2mr^2} + R_{nl}(r)V(r){\rm Y}_l^m(\theta,\phi)$$
$$= ER_{nl}(r){\rm Y}_l^m(\theta,\phi) \quad (6.14.6)$$

因为 ${\rm Y}_l^m(\theta,\phi)$ 是 $L^2$ 的本征函数. $L^2{\rm Y}_l^m(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1){\rm Y}_l^m(\theta,\phi)$ 所以,径向方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[rR_{nl}(r)] + \left[\frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1) + V(r)\right]R_{nl}(r) = ER_{nl}(r) \quad (6.14.7)$$

(b) 当 $l=0$ 时,我们有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[rR_{n0}(r)] + V(r)R_{n0}(r) = ER_{n0}(r) \quad (6.14.8)$$

我们记 $R_{n0}(r) = R(r)$,当 $r > a$,函数必须为零[因为 $V(r)$ 是无限的];而当 $0 \leqslant r \leqslant a$ 时,我们有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR(r)) = ER(r) \quad (6.14.9)$$

我们将 $U(r) = rR(r)$ 代入,有 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = EU(r)$ 或

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}U(r) = 0 \quad (6.14.10)$$

(6.14.10)的解是

$$U(r) = A\cos(kr) + B\sin(kr) \tag{6.14.11}$$

这里 $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$. $A$ 和 $B$ 是常数,由下述边界条件确定.

Ⅰ $U$ 在 $r=0$ 时为零: $U(r=0)=[rR(r)]_{r=0}=0$;

Ⅱ $U$ 在 $r=a$ 时为零: $U(r=a)=[rR(r)]_{r=a}=0$.

这样,从条件Ⅰ,我们有 $U(0)=A=0$, 并利用第二个边界条件

$$U(a) = B\sin(ka) = 0, \Rightarrow ka = n\pi \tag{6.14.12}$$

我们得到

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \tag{6.14.13}$$

最后,我们利用波函数 $R(r)$的归一化条件.计算 $B$ 的值, $R(r)$为

$$R(r) = \frac{U(r)}{r} = \begin{cases} B\dfrac{\sin(kr)}{r}, & 0\leqslant r\leqslant a \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \tag{6.14.14}$$

所以

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 4\pi r^2 \mathrm{d}r = \int_0^a 4\pi B^2 \frac{\sin^2(kr)}{r^2} r^2 \mathrm{d}r = 4\pi B^2 \int_0^a \sin(kr)\mathrm{d}r$$

$$= \frac{4\pi B^2}{k}\left[-\frac{1}{2}\cos x\sin x + \frac{1}{2}x\right]\Bigg|_0^{ka=n\pi} = \frac{2n\pi^2 B^2}{n\pi/a} = 1 \tag{6.14.15}$$

于是 $B=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi a}}$,这样,当 $l=0$,我们有

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{1}{r}\sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r\right) \tag{6.14.16}$$

**6.15** 考虑三维各向同性谐振子的哈密顿量

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2) \tag{6.15.1}$$

(a) 用球坐标写出哈密顿量;(b)求出球坐标中的哈密顿量本征函数;(c)求能量本征值.

**解** (a)我们首先写出

$$p_y^2 + p_x^2 + p_z^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\hbar^2\nabla^2 \tag{6.15.2}$$

在球坐标中,它变为

$$-\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{6.15.3}$$

利用 $L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$,我们得到

$$-\hbar^2\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2(r)}{\partial r^2} + \frac{L^2}{r^2} \tag{6.15.4}$$

因此,在球坐标系中,哈密顿量是

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2(r)}{\partial r^2} + \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{m\omega^2}{2}r^2 \tag{6.15.5}$$

(b)角动量仅以 $L^2$ 的形式依赖于哈密顿量;所以将本征函数写成 $\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y_l^m(\theta,\phi)$的形式,我们有

$$H\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y_l^m(\theta,\phi)}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR(r))+\frac{R(r)}{2mr^2}L^2Y_l^m(\theta,\phi)+\frac{m\omega^2}{2}r^2R(r)Y_l^m=E\psi \tag{6.15.6}$$

或

$$HR(r)Y_l^m=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{Y_l^m}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR(r))+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}R(r)Y_l^m+\frac{m\omega^2}{2}R(r)Y_l^m+\frac{m\omega^2}{2}r^2R(r)Y_l^m$$
$$=ER(r)Y_l^m \tag{6.15.7}$$

我们得到径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR(r))+\left[\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}+\frac{m\omega^2}{2}r^2\right]R(r)=ER(r) \tag{6.15.8}$$

代入 $u(r)=rR(r)$,方程(6.15.8)变为$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2}+\left(\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^3}+\frac{m\omega^2}{2}r\right)u(r)=E\frac{u(r)}{r}$, 或

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}r^2+\frac{2mE}{\hbar^2}\right]u(r)=0 \tag{6.15.9}$$

我们记 $\beta^2\equiv\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$ 和 $\varepsilon\equiv\frac{2mE}{\hbar^2}$;于是我们得到

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\beta^2r^2+\varepsilon\right]u(r)=0 \tag{6.15.10}$$

注意,对于大的 $r$,方程(6.15.10)的主要部分$\left(\frac{d^2}{dr^2}-\beta^2r^2\right)u(r)=0$,所以对大的 $r$

$$u(r)\sim g(r)e^{-\beta r^2/2} \tag{6.15.11}$$

我们来计算

$$\frac{d^2u}{dr^2}=\frac{d}{dr}(g'e^{-\beta r^2/2}-\beta rge^{-\beta r^2/2})=(g''e^{-\beta r^2/2}-\beta ge^{-\beta r^2/2}-2\beta rg'e^{-\beta r^2/2}+\beta^2r^2ge^{-\beta r^2/2})$$
$$=(g''-\beta g-\beta rg'+\beta^2r^2g)e^{-\beta r^2/2} \tag{6.15.12}$$

所以我们有

$$\left[g''-\beta g-2\beta rg'+\beta^2r^2g-\frac{l(l+1)g}{r^2}-\beta^2r^2g-\varepsilon g\right]e^{-\beta r^2/2}=0 \tag{6.15.13}$$

$g(r)$的微分方程是

$$g''-2\beta rg'+(\varepsilon-\beta)g-\frac{l(l+1)}{r^2}g=0 \tag{6.15.14}$$

我们写 $g(r)=r^s\sum_{n=0}^{\infty}a_nr^n$(因为 $a_0\neq0$),于是 $g'=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(n+s)r^{s+n-1}$,以及

$$g''=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(n+s)(n+s-1)r^{s+n-2}=\sum_{n=-2}^{\infty}a_{n+2}(n+s+2)(n+s+1)r^{s+n} \tag{6.15.15}$$

注意$\frac{g}{r^2}=\sum_{n=0}^{\infty}a_nr^{s+n-2}=\sum_{n=-2}^{\infty}a_{n+2}r^{s+n}$ ,于是方程(6.15.14)变为

$$\sum_{n=-2}^{\infty}a_{n+2}[(n+s+2)(n+s+1)-l(l+1)]r^{s+n}+\sum_{n=0}^{\infty}a_n[-2\beta(n+s)+\varepsilon-\beta]r^{s+n}=0 \tag{6.15.16}$$

当 $n=-2$ 时,我们有$[s(s-1)-l(l+1)]a_0=0$,因为 $a_0\neq0$,导致 $s=l+1$,当 $n=-1$ 时,我们有$[(s+1)s-l(l+1)]a_1=0$, 因为 $s=l+1$, 我们得到 $a_1=0$; 于是

$$a_{n+2}=\frac{\varepsilon-3\beta-2\beta(n+l)}{(n+l+3)(n+l+2)-l(l+1)}a_n \tag{6.15.17}$$

(c) 对于大的 $r$,本征函数必须有界,于是我们要求 $g(r)$必须是有限次幂多项式.即对于确定的 $n_0$,

我们令 $a_{n_0}=0$

$$\frac{\epsilon-3\beta-2\beta(n_0+l)}{(n_0+l+3)(n_0+l+2)-l(l+1)}=0 \tag{6.15.18}$$

或 $\epsilon=3\beta+2\beta(n_0+1)=2mE_{n_0}/\hbar^2$. 这样,能量本征值是

$$E_{n'l}=\frac{\hbar^2}{2m}[3\beta+2\beta(n'+l)]=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}[3+2(n'+l)]=\left(\frac{3}{2}+n'+l\right)\hbar\omega \tag{6.15.19}$$

**6.16** 考虑无限小转动算符

$$U_R(\mathrm{d}\theta,\ \hat{\boldsymbol{n}})=\mathbf{1}-\mathrm{d}\theta\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{n}} \tag{6.16.1}$$

求有限角 $\theta$ 的转动算符. 提示:定义当 $N\to\infty$ 时 $\mathrm{d}\theta=\theta/N$.

**解** 令 $|\psi\rangle$ 是坐标系 $O$ 中的态矢量. 在坐标系 $O'$ 中绕 $\hat{n}$ 轴旋转角度 $\theta$(相对于0)的态矢量是

$$|\psi'\rangle=[U_R(\mathrm{d}\theta,\ \hat{\boldsymbol{n}})]^N|\psi\rangle \tag{6.16.2}$$

所以有限角 $\theta$ 的旋转算符是 $U_R(\theta,\ \hat{m})=[U_R(\mathrm{d}\theta,\ \hat{\boldsymbol{n}})]^N$, 我们得到

$$U_R(\theta,\ \hat{\boldsymbol{n}})=\lim_{N\to\infty}\left(\mathbf{1}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\frac{\theta}{N}\right)^N \tag{6.16.3}$$

想到 $\lim\limits_{N\to\infty}\left(1+\frac{\alpha}{N}\right)^N=\mathrm{e}^{\alpha}$; 于是利用该恒等式,最后我们得到

$$U_R(\theta,\ \hat{\boldsymbol{n}})=\lim_{N\to\infty}\left[\mathbf{1}+\frac{1}{N}\left(-\frac{\mathrm{i}\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}}{\hbar}\theta\right)\right]^N=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\right) \tag{6.16.4}$$

**6.17** (a) 参考问题6.16,计算当 $l=1$ 时,绕 $\hat{n}=\hat{y}$ 的转动算符;(b)利用(a)中得到的转动算符,求 $L_x$ 在 $L_z$ 的标准基上的本征态矢量表示.

**解** (a)考虑转动算符 $U_R=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\theta}{\hbar}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{n}\right)$, 当 $\hat{\boldsymbol{n}}=\hat{y}$, 我们有

$$U_R=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\boldsymbol{L}_y\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\boldsymbol{L}_y\right)^n \tag{6.17.1}$$

我们来计算

$$\frac{L_y}{\hbar}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\ 0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-1&0\\ 1&0&-1\\ 0&1&0\end{pmatrix} \tag{6.17.2}$$

$$\left(\frac{L_y}{\hbar}\right)^2=-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&0&1\\ 0&-2&0\\ 1&0&-1\end{pmatrix} \tag{6.17.3}$$

和

$$\left(\frac{L_y}{\hbar}\right)^3=-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{8}}\begin{pmatrix}0&2&0\\ -2&0&2\\ 0&-2&0\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-1&0\\ 1&0&-1\\ 0&1&0\end{pmatrix}=\frac{L_y}{\hbar} \tag{6.17.4}$$

于是我们得到

$$\begin{aligned}U_R&=1+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\theta)^{2n+1}}{(2n+1)!}\left(\frac{L_y}{\hbar}\right)+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\theta)^{2n}}{(2n)!}\left(\frac{L_y}{\hbar}\right)^2\\&=1-\mathrm{i}\frac{L_y}{\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\theta^{2n+1}}{(2n+1)!}+\left(\frac{L_y}{\hbar}\right)^2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\theta^{2n}}{(2n)!}\end{aligned} \tag{6.17.5}$$

注意

$$\sin\theta=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\theta^{2n+1}}{(2n+1)!},\quad \cos\theta-1=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\theta^{2n}}{(2n)!} \tag{6.17.6}$$

所以

$$U_R = 1 - \mathrm{i}\sin\theta\frac{L_y}{\hbar} + (\cos\theta - 1)\left(\frac{L_y}{\hbar}\right)^2 \tag{6.17.7}$$

或

$$U_R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - (\cos\theta - 1)\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1+\cos\theta}{2} & -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} & \frac{1-\cos\theta}{2} \\ \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} & \cos\theta & -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1-\cos\theta}{2} & \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} & \frac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{6.17.8}$$

(b) 要从 $L_z$ 的本征矢量求出 $L_x$ 的本征态矢量,我们必须旋转 $L_z$ 的本征态矢量 $\theta=\pi/2$;所以,在本题中,我们有

$$U_R(\pi/2,\ \hat{y}) = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} \tag{6.17.9}$$

这样

$$|1\rangle_x = U_R\left(\frac{\pi}{2},\ \hat{y}\right)|1\rangle,\quad |0\rangle_x = U_R\left(\frac{\pi}{2},\ \hat{y}\right)|0\rangle$$

$$|-1\rangle_x = U_R\left(\frac{\pi}{2},\ \hat{y}\right)|-1\rangle \tag{6.17.10}$$

这里

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{6.17.11}$$

是标准基,所以

$$|1\rangle_x = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{2}|-1\rangle \tag{6.17.12}$$

$$|0\rangle_x = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |-1\rangle) \tag{6.17.13}$$

和

$$|-1\rangle_x = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{2}|-1\rangle \tag{6.17.14}$$

## 补 充 习 题

**6.18** 证明如下关系(a) $[L_i,\ p_j] = \mathrm{i}\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}p_k$;(b) $[L_i,\ p^2] = [L_i,\ r^2] = [L_i,\ \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}] = 0$.

这里 $i$、$j$、$k$ 是代表 $x$、$y$、$z$ 的哑指标以及

$$\in_{ijk}=\begin{cases}1, & ijk\ \text{正序循环}\\ -1, & ijk\ \text{逆序循环}\\ 0, & \text{其他}\end{cases} \tag{6.18.1}$$

提示:根据定义 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 并利用 $L_k=(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_k=\sum_{i,j}\in_{ijk}r_ip_j$.

**6.19** 对角动量算符证明如下关系:(a) $L^2=L_+L_- -\hbar L_z+L_z^2$;

(b) $[L_z, L_\pm]=\pm\hbar L_\pm$.

**6.20** 证明如果 $L_x$ 和 $L_y$ 的矩阵元是实数,即

$$\langle lm|L_x|l'm'\rangle^*=\langle lm|L_x|l'm'\rangle,\quad \langle lm|L_y|l'm'\rangle^*=\langle lm|L_y|l'm'\rangle \tag{6.20.1}$$

那么 $L_z$ 的矩阵元是虚数.$\langle lm|L_z|l'm'\rangle^*=-\langle lm|L_z|l'm'\rangle$.提示:$[L_x, L_y]=\mathrm{i}\hbar L_z$.

**6.21** 对角动量 $l=1$ 的体系,求 $L_xL_y+L_yL_x$ 的本征值和本征态矢量

**答案**　$|v_1\rangle=|1, 0\rangle$; $|v_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{i}|1, 1\rangle+|1, -1\rangle)$; $|v_3\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(-\mathrm{i}|1, 1\rangle+|1, -1\rangle)$.

**6.22** 在角动量 $l=1$ 的体系中,$L_z$ 的本征值由 $|+1\rangle$,$|0\rangle$ 和 $|-1\rangle$ 给出,这里

$$L_z|+1\rangle=\hbar|+1\rangle,\quad L_z|-1\rangle=-\hbar|-1\rangle,\quad L_z|0\rangle=0 \tag{6.22.1}$$

哈密顿量是 $H=\frac{\omega_0}{\hbar}(L_x^2-L_y^2)$,这里 $\omega_0$ 是常数.求(a)以 $|+1\rangle$、$|0\rangle$ 和 $|-1\rangle$ 为基,$H$ 的矩阵表示;(b)本征值和本征态矢量.

**答案**　(a)

$$\begin{array}{c} \quad\quad\quad |+1\rangle\ |0\rangle\ |-1\rangle \\ H=\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{matrix}|+1\rangle\\|0\rangle\\|-1\rangle\end{matrix}\end{array}$$

(b) 本征值和本征态矢量是 $\omega_0\hbar|+1\rangle$, $2\omega_0\hbar|0\rangle$ 和 $\omega_0\hbar|-1\rangle$.

**6.23** 证明:在球坐标系下,算符 $L_x$、$L_y$ 和 $L_z$ 可写成

$$\begin{cases}L_x=-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}+\cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\ L_y=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\ L_z=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\end{cases} \tag{6.23.1}$$

**6.24** 三维各向同性谐振子的哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2) \tag{6.24.1}$$

计算如下对易关系:(a) $[H, L_z]$;(b) $[H, H_z]$;(c) $[L, H_z]$,这里 $H_z=\frac{1}{2m}p_z^2+\frac{1}{2}m\omega^2z^2$

**答案**　(a) $[H, L_z]=0$;(b) $[H, H_z]=0$;(c) $[L, H_z]=0$.

**6.25** 证明角动量算符 $L$ 平均值的时间导数由式

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{L}\rangle}{\mathrm{d}t}=-\langle\boldsymbol{r}\times\nabla V\rangle$$

给出,这里 $V$ 是势,在有心势下,$\boldsymbol{L}$ 的时间导数有何特征?

**答案**　对有心势 $\nabla\propto\boldsymbol{r}\Rightarrow\boldsymbol{r}\times\nabla V=0$, $\boldsymbol{L}$ 的时间导数为零,于是 $L^2$ 的本征值和时间无关.

**6.26** 利用如下的数据,计算 $P_4(x)$:(a) $P_4(x)$ 是 4 次幂的多项式.(b) $P_4(1)=1$.(c) $P_4(x)$ 和 $1, x, x^2$ 及 $x^3$ 是正交的,即 $\int_{-1}^{1}x^kP_4(x)\mathrm{d}x=0$ 当 $k=1, 2, 3$.

**提示**　选择 $P_4(x)$ 具有形式 $P_4(x)=\sum_{k=0}^{4}c_kx^k$,

**答案** $P_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4+30x^2+3)$.

**6.27** 设$|\psi\rangle$是某体系的态函数,而 $U_R(\theta,\boldsymbol{n})$($\boldsymbol{n}$ 是单位矢量)是绕 $\boldsymbol{n}$ 转$\theta$角的转动算符.这样$|\psi'\rangle=U_R|\psi\rangle$是坐标系绕 $\boldsymbol{n}$ 旋转$\theta$角的态函数.利用矩表示证明当 $l=1$, $U_R(\theta,\boldsymbol{n})=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\right)$(这个算符是所有 $l$ 值的转动算符).

# 第七章 自 旋

## 7.1 定义

自旋是粒子的内禀性质，该性质是从 Stern-Gerlach 实验演绎出来的，自旋算符的公式化定义模仿角动量算符(参看第六章)

$$S^2 |\alpha\rangle = S(S+1)\hbar^2 |\alpha\rangle \tag{7.1}$$

$|\alpha\rangle$是 $S^2$ 的一个本征函数，而 $S(S+1)$是相应的本征值，我们还定义

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \tag{7.2}$$

这里 $S_x$、$S_y$ 和 $S_z$ 遵守如下的对易关系：

$$[S_x, S_y] = \mathrm{i}\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = \mathrm{i}\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = \mathrm{i}\hbar S_y \tag{7.3}$$

仿照角动量，自旋在 $z$ 方向的量子数是 $m_S = -S, -S+1, \cdots, +S$，以及

$$S_z |\alpha\rangle = m_S\hbar |\alpha\rangle \tag{7.4}$$

## 7.2 1/2 自旋

对于具有$\frac{1}{2}$自旋的粒子(例如，电子)，我们有 $m_S = \pm\frac{1}{2}$和 $S^2$ 及 $S_z$ 的两个不同的本征态矢量，记为$|+\frac{1}{2}\rangle$和$|-\frac{1}{2}\rangle$. 这些本征态矢量称为标准基，这里

$$S^2 |\pm\frac{1}{2}\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\pm\frac{1}{2}\rangle, \qquad S_z |\pm\frac{1}{2}\rangle = \pm\frac{\hbar}{2} |\pm\frac{1}{2}\rangle \tag{7.5}$$

像它的名称标准基所喻示的，虽然也有其他的基可以使用，我们常常使用的就是这组基. 自旋空间的任何波函数都可以写为标准基的线性组合.

## 7.3 泡利矩阵

泡利矩阵用

$$S = \frac{\hbar}{2}\sigma \tag{7.6}$$

定义，这里

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.7}$$

$S$ 是在标准基下写出的，泡利矩阵的对易关系是

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2\mathrm{i}\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2\mathrm{i}\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2\mathrm{i}\sigma_y \tag{7.8}$$

泡利矩阵另外两个有用的关系式是

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1} \tag{7.9}$$

和

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})1 + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) \tag{7.10}$$

这里 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个空间矢量.

### 7.4 降算符和升算符

仿照角动量,我们定义自旋降算符和自旋升算符

$$S_+ = S_x + \mathrm{i}S_y, S_- = S_x - \mathrm{i}S_y \tag{7.11}$$

这里

$$S_+|+\frac{1}{2}\rangle = 0, \quad S_-|+\frac{1}{2}\rangle = \hbar\,|-\frac{1}{2}\rangle \tag{7.12}$$

$$S_+|-\frac{1}{2}\rangle = \hbar\,|+\frac{1}{2}\rangle, \quad S_-|-\frac{1}{2}\rangle = 0 \tag{7.13}$$

### 7.5 自旋空间的旋转

欲求出 $|\alpha\rangle$ 在给定坐标系下的表示,而该坐标系绕单位矢量 $\hat{u}$ 的方向旋转一个角度 $\theta$,我们要计算

$$|\alpha\rangle' = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\hat{u}\cdot\boldsymbol{S}\right)|\alpha\rangle \tag{7.14}$$

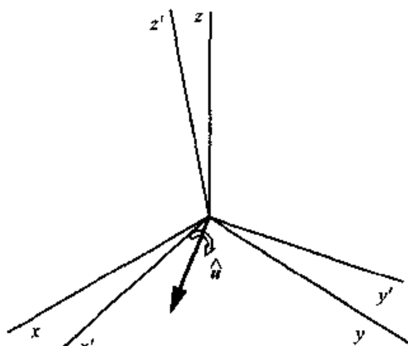



图 7-1

这样,转动矩阵是

$$U_R = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\hat{u}\cdot\boldsymbol{S}\right) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\ \sin(\theta/2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{7.15}$$

注意,当 $\phi=0$(绕 $z$ 一轴旋转)我们有

$$U_R = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{7.16}$$

它是绕 $z$ 一轴 $\theta/2$ 角的旋转. 自旋矢量的旋转有别于空间矢量的旋转. 这一结果对自旋矢量是惟一的,因而可以用来定义自旋矢量. 自旋矢量称为旋量(spinor).

### 7.6 与磁场的相互作用

考虑一个自旋为 $S$ 的粒子构成的体系. 旋加磁场 $\boldsymbol{B}$ 将在自由哈密顿量 $H_0$ 上引起一个附加项,于是

$$H = H_0 + H_{\text{int}} = H_0 + \frac{e\boldsymbol{B}}{mc}\cdot\boldsymbol{S} \tag{7.17}$$

## 例 题 解 答

7.1 计算对易关系 $[\sigma_i, \sigma_j]$,这里 $j = x、y、z$,而 $\sigma_i$ 是泡利矩阵.

**解** 我们一开始先考虑泡利矩阵

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

所以,我们看到

$$[\sigma_x,\sigma_y]=\sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\mathrm{i}&0\\0&-\mathrm{i}\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-\mathrm{i}&0\\0&\mathrm{i}\end{pmatrix}=2\mathrm{i}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=2\mathrm{i}\sigma_z \tag{7.1.1}$$

以及

$$[\sigma_y,\sigma_z]=\sigma_y\sigma_z-\sigma_z\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\-\mathrm{i}&0\end{pmatrix}=2\mathrm{i}\sigma_x \tag{7.1.2}$$

最后

$$[\sigma_z,\sigma_x]=\sigma_z\sigma_x-\sigma_x\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}=2\mathrm{i}\sigma_y \tag{7.1.3}$$

于是,我们总结出

$$[\sigma_i,\sigma_j]=2\mathrm{i}\epsilon_{ijk}\sigma_k \tag{7.1.4}$$

这里

$$\epsilon_{ijk}=\begin{cases}1, & ijk\quad \text{循环排列}\\-1, & ijk\quad \text{反循环排列}\\0, & \text{其他}\end{cases}$$

**7.2** 用 $S_z$ 的本征态矢量作为基矢量,计算 $S_i|+\frac{1}{2}\rangle$ 和 $S_i|-\frac{1}{2}\rangle(i=x,y,z)$,这里 $|+\frac{1}{2}\rangle$ 和 $|-\frac{1}{2}\rangle$ 分别是 $S_z$ 的本征值为 $+\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 的本征矢量.

**解** 自旋算符是(参看理论摘要,第7.3节)

$$S_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad S_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{7.2.1}$$

和 $\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$. 记为 $|+\frac{1}{2}\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|-\frac{1}{2}\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$,我们可写出

$$S_x|+\tfrac{1}{2}\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}|-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{7.2.2}$$

$$S_x|-\tfrac{1}{2}\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}|+\tfrac{1}{2}\rangle \tag{7.2.3}$$

注意 $S_x$ 产生了 $S_z$ 本征矢量之间的跃迁,这样当 $S_x$ 作用于一个本征态时,得到另一个本征态乘以一个常数,$S_y$ 也同样的.

$$S_y|+\tfrac{1}{2}\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{\hbar\mathrm{i}}{2}|-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{7.2.4}$$

$$S_y\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}-i\\0\end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle \tag{7.2.5}$$

以及,像预期的那样

$$S_z\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle \tag{7.2.6}$$

$$S_z\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{7.2.7}$$

**7.3** (a) 如果电子自旋的 $z$ 分量是 $+\hbar/2$,电子自旋在 $z'$方向的分量是 $+\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 的概率各是多大? $z'$和 $z$ 轴成 $\theta$ 角(参看图 7-2);(b) 电子自旋沿 $z'$的平均值是多大?

**解** (a) 电子的本态是$\left|+\frac{1}{2}\right\rangle$,沿 $z'$的自旋算符分量是

$$S_{z'}=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} \tag{7.3.1}$$

这里 $\boldsymbol{n}$ 是$z'$方向的单位矢量.在本题已知条件下,$\boldsymbol{n}=\hat{x}\sin\theta\cos\phi+\hat{y}\sin\theta\sin\phi+\hat{z}\cos\theta$,因此

$$S_{z'}=S_x\sin\theta\cos\phi+S_y\sin\theta\sin\phi+S_z\cos\theta \tag{7.3.2}$$

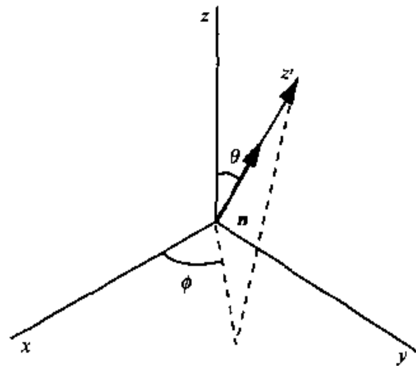


图 7-2

$S_{z'}$的本征值是 $+\hbar/2$ 或 $-\hbar/2$,而 $S_{z'}$的本征向量用 $S_z$ 的基矢表示为

$$\left|+\frac{1}{2}\right\rangle'=a\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+b\left|-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{7.3.3}$$

$$S_{z'}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle'=+\frac{\hbar}{2}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle' \tag{7.3.4}$$

和

$$\left|-\frac{1}{2}\right\rangle'=c\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+d\left|-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{7.3.5}$$

$$S_{z'}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle'=-\frac{\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle' \tag{7.3.6}$$

这里 $a$、$b$、$c$ 和$d$ 是复常数.将(7.3.2)和(7.3.3)代入(7.3.4)我们得到

$$\begin{aligned}&(S_x\sin\theta\cos\phi+S_y\sin\theta\sin\phi+S_z\cos\theta)\left(a\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+b\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)\\&=\frac{\hbar}{2}\left(a\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+b\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)\end{aligned} \tag{7.3.7}$$

利用已知的关系

$$\begin{cases}S_x\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\\S_y\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{i\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle,\\S_z\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle\end{cases}\quad\begin{cases}S_x\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{\hbar}{2}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle\\S_y\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=-\frac{i\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\\S_z\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=-\frac{\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\end{cases} \tag{7.3.8}$$

于是(7.3.7)变为

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar a}{2}\left\{\sin\theta\cos\phi\left|-\frac{1}{2}\right\rangle+i\sin\theta\sin\phi\left|-\frac{1}{2}\right\rangle+\cos\theta\left|+\frac{1}{2}\right\rangle\right\}\\&+\frac{\hbar b}{2}\left\{\sin\theta\cos\phi\left|+\frac{1}{2}\right\rangle-i\sin\theta\sin\phi\left|+\frac{1}{2}\right\rangle-\cos\theta\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right\}\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left(a\,|+\tfrac{1}{2}\rangle + b\,|-\tfrac{1}{2}\rangle\right) \tag{7.3.9}$$

所以,我们得到

$$\begin{cases} a\sin\theta\cos\phi + \mathrm{i}a\sin\theta\sin\phi - b\cos\theta = b \\ a\cos\theta + b\sin\theta\cos\phi - \mathrm{i}b\sin\theta\sin\phi = a \end{cases} \tag{7.3.10}$$

或 $a = \frac{(1+\cos\theta)b}{\sin\theta(\cos\phi + \mathrm{i}\sin\phi)}$. $|+\frac{1}{2}\rangle$必须是单位矢量;这样$|a|^2+|b|^2=1$以及$|b|^2\left(1+\frac{(1+\cos\theta)^2}{\sin^2\theta}\right)=1$

于是

$$|b|^2 = \frac{\sin^2\theta}{2+2\cos\theta} = \frac{\sin^2\theta}{4\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} = \frac{4\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}{4\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{7.3.11}$$

我们取 $b = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin(\theta/2)$,所以

$$a = \frac{(1+\cos\theta)}{\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} = \frac{2\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sin\theta} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{7.3.12}$$

这样,我们就得到

$$|+\tfrac{1}{2}\rangle' = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\tfrac{1}{2}\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,|-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{7.3.13}$$

因为$|-\frac{1}{2}\rangle'$和$|+\frac{1}{2}\rangle'$是正交的,我们有

$$\langle+\tfrac{1}{2}|-\tfrac{1}{2}\rangle = c\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + d\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} = 0 \Rightarrow c = -\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}d \tag{7.3.14}$$

注意,因为$|-\frac{1}{2}\rangle'$也是单位矢量,于是$|c|^2+|d|^2=1$. 代入 $c$,我们得到$[\tan^2(\theta/2)+1]|d|^2=1$,或$|d|^2=\cos^2(\theta/2)$,我们取 $d=\cos(\theta/2)$. 这样 $c=-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin(\theta/2)$,因此

$$|-\tfrac{1}{2}\rangle' = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,|+\tfrac{1}{2}\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{7.3.15}$$

电子的本态用 $S_{z'}$ 的本征基矢表示为

$$\begin{aligned} |+\tfrac{1}{2}\rangle &= {}'\langle+\tfrac{1}{2}|+\tfrac{1}{2}\rangle\,|+\tfrac{1}{2}\rangle' + {}'\langle+\tfrac{1}{2}|-\tfrac{1}{2}\rangle\,|-\tfrac{1}{2}\rangle' \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\tfrac{1}{2}\rangle' + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,|-\tfrac{1}{2}\rangle' \end{aligned} \tag{7.3.16}$$

所以,电子自旋沿 $z'$的分量$+\hbar/2$的概率为

$$P\left(\frac{+\hbar}{2}\right) = \left|{}'\langle+\tfrac{1}{2}|+\tfrac{1}{2}\rangle\right|^2 = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{7.3.17}$$

面分量为$-\hbar/2$的概率为

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \left|{}'\langle-\tfrac{1}{2}|+\tfrac{1}{2}\rangle\right|^2 = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{7.3.18}$$

(b) 自旋沿 $z'$轴的平均值是$\langle S_{z'}\rangle = \langle+\frac{1}{2}|S_{z'}|+\frac{1}{2}\rangle$. 利用关系式

$$\begin{aligned} S_{z'}\,|+\tfrac{1}{2}\rangle &= S_{z'}\left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\tfrac{1}{2}\rangle' + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,|-\tfrac{1}{2}\rangle'\right) \\ &= \frac{\hbar}{2}\left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\tfrac{1}{2}\rangle' - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,|-\tfrac{1}{2}\rangle'\right) \end{aligned} \tag{7.3.19}$$

我们得到

$$\langle S_{z'}\rangle = \langle+\tfrac{1}{2}|S_{z'}|+\tfrac{1}{2}\rangle = \langle+\tfrac{1}{2}|\frac{\hbar}{2}\left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\tfrac{1}{2}\rangle' - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,|-\tfrac{1}{2}\rangle'\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2}[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\langle +\frac{1}{2}|+\frac{1}{2}\rangle' - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\phi}\langle +\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}\rangle']$$

$$= \frac{\hbar}{2}[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\phi}]$$

$$= \frac{\hbar}{2}[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)] = \frac{\hbar\cos\theta}{2} \tag{7.3.20}$$

**7.4** 考虑自旋为 $S=1/2$ 的粒子.(a)求算符 $S_x+S_y$ 的本征值和本征函数.这里 $S_i$ 是 $i$ 方向的自旋算符($i=x,y,x$);(b)设$|\alpha\rangle$表示算符 $S_x+S_y$ 属于最大本征值的本征函数,并且粒子处于态$|\alpha\rangle$.如果我们测量沿 $z$ 方向的自旋,其值是多少?概率是多大?(c)粒子处于态$|\alpha\rangle$.求方向 $\boldsymbol{n}$,使得如有可能,在 $\boldsymbol{n}$ 方向测量自旋肯定能得到值$S_n=\hbar/2$.

**解** 我们首先写出矩阵

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7.4.1}$$

这样

$$\hat{A} = S_x + S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & i-1\\ i+1 & 0\end{pmatrix} \tag{7.4.2}$$

要求出该算符的本征值 $\lambda\hbar/2$,我们必须解久期方程 $\det[\hat{A}-(\lambda\hbar/2)\mathbf{1}]=0$,即

$$\det\left\{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}-\lambda & 1-i\\ 1+i & -\lambda\end{pmatrix}\right\} = 0 \Rightarrow \left(\frac{\hbar}{2}\right)^4[\lambda^2-(1-i)(1+i)] = 0 \tag{7.4.3}$$

于是,$\lambda^2-2=0$,它给出 $\lambda=\pm\sqrt{2}$,这样 $\widetilde{A}$ 的本征值是$\pm\hbar/\sqrt{2}$.算符 $\widetilde{A}$ 相应于本征值$\pm\hbar/\sqrt{2}$的本征函数是

$$\ker\left\{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}-\sqrt{2} & 1-i\\ 1+i & -\sqrt{2}\end{pmatrix}\right\} = \ker\begin{pmatrix}-\sqrt{2} & 1-i\\ 1+i & -\sqrt{2}\end{pmatrix} \tag{7.4.4}$$

它是态 $a|+\frac{1}{2}\rangle+b|-\frac{1}{2}\rangle$,这里

$$\begin{pmatrix}-\sqrt{2} & 1-i\\ 1+i & -\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases}-\sqrt{2}a+(1-i)b=0\\ (1+i)a-\sqrt{2}b=0\end{cases} \tag{7.4.5}$$

于是 $a=\frac{\sqrt{2}}{1+i}b$.因为 $a|+\frac{1}{2}\rangle+b|-\frac{1}{2}\rangle$应当是归一化的.我们必须满足条件$|a|^2+|b|^2=1$,所以

$$\left(\left|\frac{\sqrt{2}}{1+i}\right|+1\right)|b|^2 = 1 \tag{7.4.6}$$

上式给出 $b=1/2$ 和 $a=\frac{1}{i+1}=\frac{1-i}{2}=\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}$.所以求出来的第一个本征态是$|v_1\rangle=\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}|+\frac{1}{2}\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|-\frac{1}{2}\rangle$.同样地,对 $\widetilde{A}$ 的相应于本征值$-\hbar/\sqrt{2}$的第二个本征态,我们得到

$$\ker\left\{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 1-i\\ 1+i & \sqrt{2}\end{pmatrix}\right\} = \ker\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 1-i\\ 1+i & \sqrt{2}\end{pmatrix} \tag{7.4.7}$$

或$|v_2\rangle=c|+\frac{1}{2}\rangle+d|-\frac{1}{2}\rangle$,这里

$$\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 1-i\\ 1+i & \sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases}\sqrt{2}c+(1-i)d=0\\ (1+i)c+\sqrt{2}d=0\end{cases} \tag{7.4.8}$$

于是 $c=-\frac{\sqrt{2}}{1+i}d$. $|v_2\rangle$的归一化条件给出 $d=\frac{1}{\sqrt{2}}$和 $c=-\frac{1}{i+1}=e^{i3\pi/4}/\sqrt{2}$,所以有

$|v_2\rangle=\frac{e^{i3\pi/4}}{\sqrt{2}}|+\frac{1}{2}\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|-\frac{1}{2}\rangle$;于是,最后有

$$(S_x+S_y)|v_1\rangle=-\frac{\hbar}{\sqrt{2}}|v_1\rangle,\quad (S_x+S_y)|v_2\rangle=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}|v_2\rangle \tag{7.4.9}$$

(b) 算符 $S_x+S_y$ 的最大本征值是$+\hbar/\sqrt{2}$;于是

$$|\alpha\rangle=|v_1\rangle=\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}|+\frac{1}{2}\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|-\frac{1}{2}\rangle \tag{7.4.10}$$

$L_z$ 的测量能得到的值是$\pm\frac{\hbar}{2}$,得到 $S_z=\hbar/2$ 的概率是

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right)=\left|\langle+\frac{1}{2}|\alpha\rangle\right|^2=\left|\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}\right|^2=\frac{1}{2} \tag{7.4.11}$$

测得 $S_z=-\hbar/2$ 的概率为

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=-P\left(\frac{\hbar}{2}\right)=\frac{1}{2} \tag{7.4.12}$$

(c) 如果某个可观测量的测量仅给出一个结果,那么系统就处于该量的本征态. 于是,态$|\alpha\rangle$是自旋算符在某个确定方向的本征态,像在(a)中看到的那样,

$$|\alpha\rangle=|v_1\rangle=\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}}|+\frac{1}{2}\rangle+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}\rangle \tag{7.4.13}$$

$|v_1\rangle$也是算符 $S_x+S_y$ 的具有本征值$\hbar/\sqrt{2}$的本征态,即

$$(S_x+S_y)|\alpha\rangle=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}|\alpha\rangle\Rightarrow\frac{1}{\sqrt{2}}(S_x+S_y)|\alpha\rangle=\frac{\pi}{2}|\alpha\rangle$$

所以,$|\alpha\rangle$是算符 $S_x+S_y/\sqrt{2}$的本征态,$S_x+S_y/\sqrt{2}$的测量总是给出结果 $\hbar/2$. 注意$(S_x+S_y)/\sqrt{2}$是空间单位矢量 $\boldsymbol{n}=\hat{x}+\hat{y}$方向上的自旋算符. 这里 $\hat{x}$ 和 $\hat{y}$ 分别是 $x$ 和 $y$ 方向的单位矢量.

**7.5** 考虑自旋为 1/2 的粒子. (a) $S_x$、$S_y$ 和 $S_z$ 的本征值和本征态矢量是什么? (b)考虑粒子处于 $S_x$ 的本征态,如果我们测量自旋在 $z$ 方向的分量,可能的结果是什么? 测得这些结果的概率是多大? (c)在时刻 $t=0$,粒子处于 $S_x$ 的本征态,它属于本征值$-\hbar/2$. 粒子处于磁场中,其哈密顿量是 $H=\frac{eB}{mc}S_z$,求 $t>0$ 时的态. (d)如果我们在 $t=t_1$ 时刻测量 $S_x$,结果是什么? 在 $t=t_1$ 测量 $S_z$,结果是什么? 解释 $t_1$ 之依赖关系中的区别. (e)计算 $t=t_1$ 时刻 $S_x$ 和 $S_z$ 的期望值.

**解** 考虑用 $S_z$ 的本征态矢量为基矢写出的$S_x$、$S_y$ 和$S_z$ 的矩阵

$$S_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad S_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{7.5.1}$$

首先,我们将确定 $S_z$ 的本征态矢量. 对于本征值$+\hbar/2$ 我们有$|+\frac{1}{2}\rangle_z=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$,对本征值$-\hbar/2$,我们有$|-\frac{1}{2}\rangle_z=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. $S_x$ 的本征值是$\hbar\lambda/2$,这里 $\det(S_x-(\hbar\lambda/2)1)=0$;即

$$\det\left\{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}-\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\lambda&0\\0&\lambda\end{pmatrix}\right\}=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\begin{vmatrix}-\lambda&1\\1&-\lambda\end{vmatrix}=0 \tag{7.5.2}$$

或 $\lambda^2-1=0$,因此,我们得到本征值$\pm\hbar/2$. 相应于本征值$+\hbar/2$ 的本征态矢是$|+\frac{1}{2}\rangle_x=a|+\frac{1}{2}\rangle_z+b|-\frac{1}{2}\rangle_z\equiv\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$,于是

$$S_x|+\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{\hbar}{2}|+\frac{1}{2}\rangle_x\Rightarrow\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\tag{7.5.3}$$

解(7.5.3),我们得到 $b=a$.现在,$|+\frac{1}{2}\rangle$必须是归一化的,于是我们令$|a|^2+|b|^2=1$,代入 $a$ 我们得到

$$2|b|^2=1\Rightarrow a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}\tag{7.5.4}$$

这样算符 $S_x$ 的具有本征值$+\hbar/2$的本征向量是

$$|+\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\frac{1}{2}\rangle_z+|-\frac{1}{2}\rangle_z\Big)\tag{7.5.5}$$

另一个本征态矢$|-\frac{1}{2}\rangle_x$(具有本征值$-\hbar/2$)要么从正交和归一化条件得到,要么用求第一个本征态矢同样的方法得到.我们将仿照前面的求解过程

$$|-\frac{1}{2}\rangle_x=c|+\frac{1}{2}\rangle_z+b|-\frac{1}{2}\rangle_z\equiv\begin{pmatrix}c\\d\end{pmatrix}\tag{7.5.6}$$

和

$${}_x\langle-\frac{1}{2}|+\frac{1}{2}\rangle_x=(c\ d)\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{2}\end{pmatrix}=\frac{c}{\sqrt{2}}+\frac{d}{\sqrt{2}}=0\tag{7.5.7}$$

给出 $c=-d$,利用归一化条件,$|c|^2+|d|^2=1$;我们取 $c=-d=1/\sqrt{2}$并得到

$$|-\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\frac{1}{2}\rangle_z-|-\frac{1}{2}\rangle_z\Big)\tag{7.5.8}$$

同样,$S_y$ 的本征值是 $\hbar\lambda/2$,这里

$$\det\Big(S_y-\frac{\hbar}{2}\lambda\mathbf{1}\Big)=\Big(\frac{\hbar}{2}\Big)^2\begin{vmatrix}-\lambda&-i\\i&-\lambda\end{vmatrix}=0\tag{7.5.9}$$

或 $\lambda^2-1=0$;于是 $S_y$ 的本征值也是$\pm\hbar/2$,相应于本征值$+\hbar/2$的本征态矢是

$$|+\frac{1}{2}\rangle_y=a|+\frac{1}{2}\rangle_z+b|-\frac{1}{2}\rangle_z\equiv\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\tag{7.5.10}$$

这里

$$S_y|+\frac{1}{2}\rangle_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}|+\frac{1}{2}\rangle_y\tag{7.5.11}$$

这样 $ia=b$.利用归一化条件$|a|^2+|b|^2=1$,我们得到$2|b|^2=1$,于是我们可以取 $b=1/\sqrt{2}$和 $a=-i/\sqrt{2}$,最后,我们得到

$$|+\frac{1}{2}\rangle_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(-i|+\frac{1}{2}\rangle_z+|-\frac{1}{2}\rangle_z\Big)\tag{7.5.12}$$

利用$|-\frac{1}{2}\rangle_y$ 和$|+\frac{1}{2}\rangle_y$ 的正交关系,我们有$|-\frac{1}{2}\rangle_y=c|+\frac{1}{2}\rangle_z+d|-\frac{1}{2}\rangle_z$,以及

$${}_y\langle-\frac{1}{2}|+\frac{1}{2}\rangle_y=(c\ d)\begin{pmatrix}-i/\sqrt{2}\\1/\sqrt{2}\end{pmatrix}=-\frac{ic}{\sqrt{2}}+\frac{d}{\sqrt{2}}=0\tag{7.5.13}$$

于是 $d=ic$,从归一化条件,我们得到$|c|^2+|d|^2=2|c|^2=1$,这样 $c=1/\sqrt{2}$,而 $d=i/\sqrt{2}$,因此

$$|-\frac{1}{2}\rangle_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\frac{1}{2}\rangle_z+i|-\frac{1}{2}\rangle_z\Big)\tag{7.5.14}$$

(b) 我们在(a)中已经求出，$S_x$ 的本征态是

$$|+\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z+|-\frac{1}{2}\rangle_z\right),\quad |-\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z-|-\frac{1}{2}\rangle_z\right) \tag{7.5.15}$$

如果我们测量 $x$ 方向的自旋分量，粒子的态要么处在 $|+\frac{1}{2}\rangle_x$，给出 $S_x=\hbar/2$；要么处于 $|-\frac{1}{2}\rangle_x$ 给出 $S_x=-\hbar/2$. 测出 $S_x=\hbar/2$ 的概率是

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right)=\left|{}_x\langle+\frac{1}{2}|\pm\frac{1}{2}\rangle_z\right|^2=\frac{1}{2} \tag{7.5.16}$$

测出 $S_x=-\hbar/2$ 的概率是

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\left|{}_x\langle+\frac{1}{2}|\pm\frac{1}{2}\rangle_z\right|^2=\frac{1}{2} \tag{7.5.17}$$

注意，如果初态要么处于 $|+\frac{1}{2}\rangle_z$，要么处于 $|-\frac{1}{2}\rangle_z$，我们得到相同的结果.

(c) 在 $t=0$，粒子处于初态

$$|+\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z+|-\frac{1}{2}\rangle_z\right) \tag{7.5.18}$$

我们想求态的时间演变，于是利用薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$. 因为哈密顿量是与时间无关的，我们写出 $\psi(\boldsymbol{r},s,t)=\phi_1(\boldsymbol{r},s)\phi_2(t)$；代入薛定谔方程给出

$$i\hbar\phi_1(\boldsymbol{r},s)\frac{\partial\phi_2(t)}{\partial t}=\phi_2(t)H\phi_1(\boldsymbol{r},s) \tag{7.5.19}$$

假设 $\phi_2(t)$ 的形式为 $\phi_2(t)=e^{-iEt/\hbar}$，这里 $E$ 是常数，我们得到

$$E\phi_1(\boldsymbol{r},s)e^{-iEt/\hbar}=\phi_2(t)H\phi_1(\boldsymbol{r},s)\Rightarrow E\phi_1(\boldsymbol{r},s)\phi_2(t)=\phi_2(t)H\phi_1(\boldsymbol{r},s) \tag{7.5.20}$$

我们必须要求 $H\phi_1(\boldsymbol{r},s)=E\phi_1(\boldsymbol{r},s)$，换句话说，$\phi_1(\boldsymbol{r},s)$ 必须是 $H$ 的本征函数，注意

$$H=\frac{eB}{mc}S_z=(\text{常数})S_z \tag{7.5.21}$$

这样 $H$ 的本征态和 $S_z$ 的本征态相同，这里 $H$ 的本征值是 $S_z$ 的本征值乘以常数 $eB/mc$，因此

$$|\psi_1(\boldsymbol{r},s)\rangle=|+\frac{1}{2}\rangle_z,\quad E=\frac{eB\hbar}{2mc} \tag{7.5.22}$$

和

$$|\psi_1(\boldsymbol{r},s,t)\rangle=e^{-ieBt/2mc}|+\frac{1}{2}\rangle_z \tag{7.5.23}$$

以及

$$|\psi_2(\boldsymbol{r},s)\rangle=|-\frac{1}{2}\rangle_z,\quad E=-\frac{eB\hbar}{2mc} \tag{7.5.24}$$

给出

$$|\psi_2(\boldsymbol{r},s,t)\rangle=e^{ieBt/2mc}|-\frac{1}{2}\rangle_z \tag{7.5.25}$$

因而，粒子的每一个态都可以写为

$$|\psi(\boldsymbol{r},s,t)\rangle=\alpha|\psi_1(\boldsymbol{r},s,t)\rangle+\beta|\psi_2(\boldsymbol{r},s,t)\rangle=\alpha e^{-ieBt/2mc}|+\frac{1}{2}\rangle_z+\beta e^{ieBt/2mc}|-\frac{1}{2}\rangle_z \tag{7.5.26}$$

对于系统来说，初态是

$$\psi(\boldsymbol{r},s,t=0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z+|-\frac{1}{2}\rangle_z\right)=\alpha|+\frac{1}{2}\rangle_z+\beta|-\frac{1}{2}\rangle_z \tag{7.5.27}$$

所以 $\alpha=\beta=1/\sqrt{2}$，给出

$$|\psi(\boldsymbol{r},s,t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-ieBt/2mc}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle_z+\mathrm{e}^{ieBt/2mc}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle_z\right) \tag{7.5.28}$$

(d)$S_x$ 或 $S_y$ 的测量,要么给出 $+\hbar/2$,要么给出 $-\hbar/2$.测量结果 $S_x=+\hbar/2$ 的概率是

$$P_x\left(+\frac{\hbar}{2}\right)=\left|{}_x\langle+\frac{1}{2}\mid\psi(\boldsymbol{r},s,t_1)\rangle\right|^2=\left|\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{-ieBt_1/2mc}-\mathrm{e}^{ieBt_1/2mc})\right|^2=\cos^2\left(\frac{eBt_1}{2mc}\right) \tag{7.5.29}$$

对 $S_x=-\hbar/2$,我们有

$$P_x\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\left|{}_x\langle-\frac{1}{2}\mid\psi(\boldsymbol{r},s,t_1)\rangle\right|^2=\left|\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{-ieBt_1/2mc}-\mathrm{e}^{ieBt_1/2mc})\right|^2=\sin^2\left(\frac{eBt_1}{2mc}\right) \tag{7.5.30}$$

同样,对 $S_z=+\hbar/2$,概率是

$$P_z\left(+\frac{\hbar}{2}\right)=\left|{}_z\langle+\frac{1}{2}\mid\psi(\boldsymbol{r},s,t_1)\rangle\right|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-ieBt_1/2mc}\right|^2=\frac{1}{2} \tag{7.5.31}$$

对 $S_z=-\hbar/2$

$$P_z\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\left|{}_z\langle-\frac{1}{2}\mid\psi(\boldsymbol{r},s,t_1)\rangle\right|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{ieBt_1/2mc}\right|^2=\frac{1}{2} \tag{7.5.32}$$

(e) 我们可以用两种方法计算 $S_x$ 的期望值:第一种方法是$\langle\psi(\boldsymbol{r},s,t_1)|S_x|\psi(\boldsymbol{r},s,t_1)\rangle$,第二种方法是将各个可能值乘以它的概率然后求和,以下为第二种方法,

$$\langle S_x\rangle=+\frac{\hbar}{2}P_x\left(+\frac{\hbar}{2}\right)-\frac{\hbar}{2}P_x\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\frac{\hbar}{2}\left[\cos^2\left(\frac{eBt_1}{2mc}\right)-\sin^2\left(\frac{eBt_1}{2mc}\right)\right]=\frac{\hbar}{2}\cos\left(\frac{eBt_1}{2mc}\right) \tag{7.5.33}$$

同样,

$$\langle S_z\rangle=+\frac{\hbar}{2}P_z\left(+\frac{\hbar}{2}\right)-\frac{\hbar}{2}P_z\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)=0 \tag{7.5.34}$$

注意$\langle S_x\rangle$不是随时间变化守恒的,这是因为$[H,S_x]=\frac{eB}{mc}[S_z,S_x]\neq0$,而$\langle S_z\rangle$是守恒的,因为

$$[H,S_z]=\frac{eB}{mc}[S_z,S_z]=0 \tag{7.5.35}$$

**7.6** (a)证明$[S^2,S_z]=0$ 这里 $S^2=S_x^2+S_y^2+S_z^2$;(b)证明 $S_z$ 的本征矢量基将$S^2$ 对角化.求 $S^2$ 的本征值.

**解答** (a) 在问题 7.1 中,我们求出$[\sigma_x,\sigma_y]=2\mathrm{i}\sigma_z$;$[\sigma_y,\sigma_z]=2\mathrm{i}\sigma_x$ 和$[\sigma_z,\sigma_x]=2\mathrm{i}\sigma_y$,所以考虑到 $\boldsymbol{S}=\hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ 我们写出

$$[S_x,S_y]=\mathrm{i}\hbar S_z,\quad [S_y,S_z]=\mathrm{i}\hbar S_x,\quad [S_z,S_x]=\mathrm{i}\hbar S_y \tag{7.6.1}$$

所以

$$[S^2,S_z]=[S_x^2+S_y^2+S_z^2,S_z]=\sum_i[S_i^2,S_z] \tag{7.6.2}$$

这里 $i=x、y、z$,我们看到

$$\begin{aligned}[S^2,S_z]&=S_i^2S_z-S_zS_i^2+S_iS_zS_i-S_iS_zS_i\\&=S_i(S_iS_z-S_zS_i)+(S_iS_z-S_zS_i)S_i=S_i[S_i,S_z]+[S_i,S_z]S_i\end{aligned} \tag{7.6.3}$$

于是$[S_z^2,S_z]=0$.以及

$$[S_x^2,S_z]=S_x[S_x,S_z]+[S_x,S_z]S_x=-\mathrm{i}\hbar(S_xS_y+S_yS_x) \tag{7.6.4}$$

和

$$[S_y^2, S_z] = S_y[S_y, S_z] + [S_y, S_z]S_y = -i\hbar(S_yS_x + S_xS_y) \tag{7.6.5}$$

最后

$$[S^2, S_z^2] = \sum_i [S_i^2, S_z] = i\hbar(S_yS_x + S_xS_y) - i\hbar(S_xS_y + S_yS_x) = 0 \tag{7.6.6}$$

(b) 欲求出 $S^2$ 的矩阵表示，我们以 $S_z$ 的本征态矢为基矢，利用 $S_x$、$S_y$ 和 $S_z$ 的矩阵计算

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.6.7}$$

所以

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) \tag{7.6.8}$$

利用已知的结果 $\sigma_i^2 = 1$，我们得到

$$S^2 = 3\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \mathbf{1} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{7.6.9}$$

我们看到 $S^2$ 被对角化了(以 $S_z$ 的本征态矢为基). 由线性代数，我们知道如果一组矢量基将一个算符的矩阵对角化了，那么这组基就构成该算符的本征矢量，即 $|+\frac{1}{2}\rangle$ 和 $|-\frac{1}{2}\rangle$ 也是 $S^2$ 的本征态矢量. 换句话说，我们断定，如果两个算符的对易关系是零，那么对这两个算符，我们可以找到相同的本征态矢量. 要求出 $S^2$ 对本征态 $|+\frac{1}{2}\rangle$ 的本征值，我们计算

$$S^2\,|+\frac{1}{2}\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\,|+\frac{1}{2}\rangle \tag{7.6.10}$$

于是 $|+\frac{1}{2}\rangle$ 的本征值是 $3\hbar^2/4$，$|-\frac{1}{2}\rangle$ 的本征值是

$$S^2\,|-\frac{1}{2}\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\,|-\frac{1}{2}\rangle \tag{7.6.11}$$

$|-\frac{1}{2}\rangle$ 的本征值也是 $3\hbar^2/4$，注意，如果我们令 $S=\frac{1}{2}$ 为总自旋的量子数，那么(像在角动量理论那样)本征值 $3\hbar^2/4$ 可以写为 $\hbar^2 S(S+1)$.

**7.7** 求 $S_x + iS_y$ 和 $S_x - iS_y$ 作用于 $S_z$ 的本征态矢 $|+\frac{1}{2}\rangle$ 和 $|-\frac{1}{2}\rangle$ 的结果，这些算符的重要性是什么？

**解答**：我们首先从 $S_x + iS_y$ 开始，并做计算

$$(S_x + iS_y)|+\frac{1}{2}\rangle = S_x|+\frac{1}{2}\rangle + iS_y|+\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2}|-\frac{1}{2}\rangle + \left(i\frac{\hbar}{2}\right)i|-\frac{1}{2}\rangle = 0 \tag{7.7.1}$$

和

$$(S_x + iS_y)\,|-\frac{1}{2}\rangle = S_x\,|-\frac{1}{2}\rangle + iS_y\,|-\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|+\frac{1}{2}\rangle + \left(i\frac{\hbar}{2}\right)i\,|+\frac{1}{2}\rangle = \hbar\,|+\frac{1}{2}\rangle \tag{7.7.2}$$

对于算符 $S_x - iS_y$ 我们有

$$(S_x - iS_y)\,|+\frac{1}{2}\rangle = S_x\,|+\frac{1}{2}\rangle - iS_y\,|+\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|-\frac{1}{2}\rangle - \left(i\frac{\hbar}{2}\right)i\,|-\frac{1}{2}\rangle = \hbar\,|-\frac{1}{2}\rangle \tag{7.7.3}$$

和

$$(S_x - iS_y)\,|-\frac{1}{2}\rangle = S_x\,|-\frac{1}{2}\rangle - iS_y\,|-\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|+\frac{1}{2}\rangle - \left(i\frac{\hbar}{2}\right)(-i)\,|+\frac{1}{2}\rangle = 0 \tag{7.7.4}$$

结论

$$S_+|+\frac{1}{2}\rangle = 0,\quad S_-|+\frac{1}{2}\rangle = \hbar\,|-\frac{1}{2}\rangle,\quad S_+|-\frac{1}{2}\rangle = \hbar\,|+\frac{1}{2}\rangle,\quad S_-|-\frac{1}{2}\rangle = 0 \tag{7.7.5}$$

这里 $S_+ = S_x + \mathrm{i}S_y$ 和 $S_- = S_x - \mathrm{i}S_y$.最后的关系表明称 $S_+$ 为自旋升算符是合理的,因为它将 $z$ 方向的自旋从 $-\hbar/2$ 增加到 $+\hbar/2$.同样我们称 $S_-$ 为自旋降算符,因为它将自旋的 $z$ 分量从 $+\hbar/2$ 降到 $-\hbar/2$.$S_+$ 和 $S_-$ 容许我们从 $S_z$ 的一个本征态跳跃到另一个本征态.它们在自旋的计算中是非常有用的.

**7.8** 利用算符 $S_+$ 和 $S_-$ 计算矩阵 $S_x$ 和 $S_y$;证明 $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ 以 $S_z$ 的本征态矢为基矢时是对角化的.

**证明** 自旋升算符 $S_+$ 和自旋降算符 $S_-$ 定义为

$$S_+ = S_x + \mathrm{i}S_y,\quad S_- = S_x - \mathrm{i}S_y \tag{7.8.1}$$

因此,我们可以写出

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-),\quad S_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(S_+ - S_-) \tag{7.8.2}$$

所以

$$\begin{aligned}S^2 &= S_z^2 + S_x^2 + S_y^2 = S_z^2 + \frac{1}{4}(S_+ + S_-)^2 - \frac{1}{4}(S_+ - S_-)^2 \\ &= S_z^2 + \frac{1}{4}(S_+^2 + S_+S_- + S_-S_+ + S_-^2) - \frac{1}{4}(S_+^2 - S_+S_- - S_-S_+ + S_-^2 \\ &= S_z^2 + \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+)\end{aligned} \tag{7.8.3}$$

要求出 $S^2$ 的矩阵表示,我们做计算

$$\begin{aligned}S^2|+\frac{1}{2}\rangle &= \left(S_z^2 + \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+)\right)|+\frac{1}{2}\rangle \\ &= S_z^2|+\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}S_+S_-|+\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}S_-S_+|+\frac{1}{2}\rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2|+\frac{1}{2}\rangle + \frac{\hbar}{2}S_+|-\frac{1}{2}\rangle + 0 = \left(\frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{2}\right)|+\frac{1}{2}\rangle \\ &= \frac{3\hbar^2}{4}|+\frac{1}{2}\rangle\end{aligned} \tag{7.8.4}$$

以及

$$\begin{aligned}S^2|-\frac{1}{2}\rangle &= \left(S_z^2 + \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+)\right)|-\frac{1}{2}\rangle \\ &= S_z^2|-\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}S_+S_-|-\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}S_-S_+|-\frac{1}{2}\rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2|-\frac{1}{2}\rangle + \frac{\hbar}{2}S_-|+\frac{1}{2}\rangle + 0 = \left(\frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{2}\right)|-\frac{1}{2}\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}\end{aligned} \tag{7.8.5}$$

所以有

$$[S^2] = \begin{array}{c|cc} & |+\frac{1}{2}\rangle & |-\frac{1}{2}\rangle \\ \hline |+\frac{1}{2}\rangle & \frac{3\hbar^2}{4} & 0 \\ |-\frac{1}{2}\rangle & 0 & \frac{3\hbar^2}{4}\end{array} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \tag{7.8.6}$$

该式是对角化的.

**7.9** 具有自旋 1/2 的粒子，用两种方法计算 $iS_xS_yS_x$ 的期望值，这里粒子的波函数是 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)$：(a)利用算符 $S_+$ 和 $S_-$，这里 $S_+=S_x+iS_y$ 和 $S_-=S_x-iS_y$；(b)直接计算.

**解** (a) 考虑矩阵 $S_+$ 和 $S_-$

$$S_x=\frac{1}{2}(S_++S_-),\quad S_y=\frac{1}{2i}(S_++S_-) \tag{7.9.1}$$

因此

$$\hat{A}\equiv iS_xS_yS_x=\frac{i}{8i}(S_++S_-)(S_+-S_-)(S_++S_-)=\frac{1}{8}(S_+^2-S_+S_-+S_-S_+-S_-^2)(S_++S_-)$$

$$=\frac{1}{8}(S_+^3-S_+S_-S_++S_-S_+^2-S_-^2S_++S_+S_-^2-S_+S_-^2+S_-S_+S_--S_-^3) \tag{7.9.2}$$

考虑到

$$S_+\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=0,\quad S_+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\left|+\frac{1}{2}\right\rangle,\quad S_-\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\left|-\frac{1}{2}\right\rangle,\quad S_-\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=0 \tag{7.9.3}$$

所以

$$S_+^2\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=0,\qquad S_-^2\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=0 \tag{7.9.4}$$

这样，在 $\hat{A}$的表达式中，所有含有 $S_+^2$ 或 $S_-^2$ 的项对期望值都没有贡献，即

$$\langle\hat{A}\rangle=\frac{1}{2}\left[\left(\left\langle+\frac{1}{2}\right|+\left\langle-\frac{1}{2}\right|\right)iS_xS_yS_x\left(\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)\right]$$

$$=\frac{1}{16}\left[\left(\left\langle+\frac{1}{2}\right|+\left\langle-\frac{1}{2}\right|\right)S_-S_+S_-+S_+S_-S_+\left(\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)\right] \tag{7.9.5}$$

可以看出

$$S_-S_+S_-\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar^3\left|-\frac{1}{2}\right\rangle,\quad S_-S_+S_-\left|-\frac{1}{2}\right\rangle=0 \tag{7.9.6}$$

和

$$S_+S_-S_+\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=0,\quad S_+S_-S_+\left|+\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar^3\left|+\frac{1}{2}\right\rangle \tag{7.9.7}$$

代入(7.9.5)，我们得到

$$\langle\hat{A}\rangle=\frac{\hbar^3}{16}\left\{\left(\left\langle+\frac{1}{2}\right|+\left\langle-\frac{1}{2}\right|\right)\left(\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)\right.$$

$$\left.-\left(\left\langle+\frac{1}{2}\right|+\left\langle-\frac{1}{2}\right|\right)\left(\left|-\frac{1}{2}\right\rangle+\left|+\frac{1}{2}\right\rangle\right)\right\}=0 \tag{7.9.8}$$

(b) 在标准基下 $iS_xS_yS_x$ 矩阵表示是

$$\hat{A}=iS_xS_yS_x=\frac{\hbar^3 i}{8}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=\frac{i\hbar^3}{8}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}=\frac{i\hbar^3}{8}\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix} \tag{7.9.9}$$

在标准基下，粒子的波函数是$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\right)\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，因此

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{i\hbar^3}{16}(1 \quad 1)\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{i\hbar^3}{16}(1 \quad 1)\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \tag{7.9.10}$$

**7.10** 考虑对易关系

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \tag{7.10.1}$$

$$[S_z, S_y] = i\hbar S_x \tag{7.10.2}$$

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y \tag{7.10.3}$$

已知 $S_x$、$S_y$ 和 $S_z$ 是厄米算符，本征值为 $\pm\hbar/2$，求 $S_x$、$S_y$ 和 $S_z$ 在一组基下的矩阵表示，在该组基下，$S_z$ 是对角化的.

**解答**　注意 $S_x$、$S_y$ 和 $S_z$ 每一个都有两个本征向量，并且它们都是厄米算符；这样我们就可以断定它们是 2×2 矩阵，于是

$$S_x = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix}, \quad S_y = \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix}, \quad S_z = \begin{pmatrix} a_3 & b_3 \\ c_3 & d_3 \end{pmatrix} \tag{7.10.4}$$

我们想在 $S_z$ 为对角矩阵的基下写出矩阵表示，于是我们有

$$S_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.10.5}$$

将 $S_z$ 和 $S_x$ 代入(7.10.3)给出

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar\begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} \tag{7.10.6}$$

或

$$\frac{\hbar}{2}\left\{\begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ -c_1 & -d_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 \\ c_1 & -d_1 \end{pmatrix}\right\} = i\hbar\begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} \tag{7.10.7}$$

于是，我们得到

$$\begin{pmatrix} 0 & -ib_1 \\ ic_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} = S_y \tag{7.10.8}$$

$S_y$ 是厄米矩阵，即 $S_y^+ = S_y$，或$\begin{pmatrix} 0 & -ib_1 \\ ic_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -ic_1^* \\ ib_1^* & 0 \end{pmatrix}$. 因此 $b_1 = c_1 \equiv \alpha$，所以有

$$S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha \\ i\alpha^* & 0 \end{pmatrix}, \quad S_x = \begin{pmatrix} a_1 & \alpha \\ \alpha^* & d_1 \end{pmatrix} \tag{7.10.9}$$

将 $S_z$ 和 $S_y$ 代入(7.10.2)给出

$$\frac{\hbar}{2}\left\{\begin{pmatrix} 0 & -i\alpha \\ i\alpha^* & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i\alpha \\ i\alpha^* & 0 \end{pmatrix}\right\} = i\hbar\begin{pmatrix} a_1 & \alpha \\ \alpha^* & d_1 \end{pmatrix} \tag{7.10.10}$$

或

$$\frac{1}{2i}\left\{\begin{pmatrix} 0 & i\alpha \\ i\alpha^* & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha \\ -i\alpha^* & 0 \end{pmatrix}\right\} = \begin{pmatrix} a_1 & \alpha \\ \alpha^* & d_1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \alpha^* & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & \alpha \\ \alpha^* & d_1 \end{pmatrix} \tag{7.10.11}$$

这样，我们得到

$$S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha \\ i\alpha^* & 0 \end{pmatrix}, \quad S_x = \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \alpha^* & 0 \end{pmatrix} \tag{7.10.12}$$

最后，我们将 $S_x$ 和 $S_y$ 代入(7.10.1)得到

$$\left\{\begin{pmatrix}0 & \alpha\\ \alpha^* & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\alpha\\ \mathrm{i}\alpha^* & 0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\alpha\\ \mathrm{i}\alpha^* & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \alpha\\ \alpha^* & 0\end{pmatrix}\right\}=\frac{\mathrm{i}\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7.10.13}$$

或

$$\begin{pmatrix}-\mathrm{i}|\alpha|^2 & 0\\ 0 & -\mathrm{i}|\alpha|^2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-\mathrm{i}|\alpha|^2 & 0\\ 0 & -\mathrm{i}|\alpha|^2\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}|\alpha|^2 & 0\\ 0 & -|\alpha|^2\end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7.10.14}$$

这样，$|\alpha|^2=\hbar/4$. 如果我们取 $\alpha$ 为正实数($\alpha=\hbar/2$)，我们得到 $S_x$、$S_y$ 和 $S_z$ 的标准矩阵表示

$$S_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad S_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix},\quad S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7.10.15}$$

**7.11** 利用泡利矩阵证明：(a) $(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\mathbf{1}+\mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$，这里 $\sigma=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$，$\mathbf{1}$ 是 $2\times2$ 矩阵，$\boldsymbol{A}=(A_x,A_y,A_z)$，$\boldsymbol{B}=(B_x,B_y,B_z)$；(b) $\exp\left(\frac{-\mathrm{i}\theta}{2}\boldsymbol{n}\cdot\sigma\right)=\cos(\theta/2)\mathbf{1}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\sigma\sin(\theta/2)$. 考虑到我们可以用泰勒级数展开一个算符 $\hat{A}$：$\mathrm{e}^{\hat{A}}=\sum_n\frac{1}{n!}(\hat{A})^n$（参看第四章）.

**证明** (a) 首先我们考虑泡利矩阵

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_x=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_x=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7.11.1}$$

于是

$$\sigma\cdot\boldsymbol{A}=\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z=\begin{pmatrix}0 & A_x\\ A_x & 0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}A_y\\ \mathrm{i}A_y & 0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}A_z & 0\\ 0 & -A_z\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}A_z & A_x-\mathrm{i}A_y\\ A_x+\mathrm{i}A_y & -A_z\end{pmatrix} \tag{7.11.2}$$

同样 $\sigma\cdot\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}B_z & B_x-\mathrm{i}B_y\\ B_x+\mathrm{i}B_y & -B_z\end{pmatrix}$. 于是，我们得到

$$(\sigma\cdot\boldsymbol{A})(\sigma\cdot\boldsymbol{B})=\begin{pmatrix}A_z & A_x-\mathrm{i}A_y\\ A_x+\mathrm{i}A_y & -A_z\end{pmatrix}\begin{pmatrix}B_z & B_x-\mathrm{i}B_y\\ B_x+\mathrm{i}B_y & -B_z\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}A_zB_z+A_xB_x+A_yB_y+\mathrm{i}A_xB_y-\mathrm{i}A_yB_x & A_zB_x-\mathrm{i}A_zB_y-A_xB_z+\mathrm{i}A_yB_z\\ A_xB_z+\mathrm{i}A_yB_z-A_zB_x-\mathrm{i}A_zB_y & A_xB_x+A_zB_z+\mathrm{i}A_yB_x-\mathrm{i}A_xB_y+A_yB_y\end{pmatrix}$$

$$=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\mathbf{1}+\begin{pmatrix}\mathrm{i}(A_xB_y-A_yB_x) & (A_zB_x-A_xB_z)+\mathrm{i}(A_yB_z-A_zB_y)\\ (A_xB_z-A_zB_x)+\mathrm{i}(A_yB_z-A_zB_y) & \mathrm{i}(A_yB_x-A_xB_y)\end{pmatrix}$$

$$=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\mathbf{1}+(A_xB_y-A_yB_x)\begin{pmatrix}\mathrm{i} & 0\\ 0 & -\mathrm{i}\end{pmatrix}+(A_zB_x-A_xB_z)\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}+(A_yB_z-A_zB_y)\begin{pmatrix}0 & \mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix} \tag{7.11.3}$$

注意到

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}=\begin{vmatrix}\hat{x} & \hat{y} & \hat{z}\\ A_x & A_y & A_z\\ B_x & B_y & B_z\end{vmatrix}=(A_yB_z-A_zB_y)\hat{x}+(A_zB_x-A_xB_z)\hat{y}$$

$$+ (A_xB_y - A_yB_x)\hat{z} \tag{7.11.4}$$

于是有

$$\begin{aligned}(\sigma \cdot \boldsymbol{A})(\sigma \cdot \boldsymbol{B}) &= (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})\mathbf{1} + (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})_z \mathrm{i}\sigma_z + (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})_y \mathrm{i}\sigma_y + (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})_x \mathrm{i}\sigma_x \\ &= \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + \mathrm{i}\sigma \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})\end{aligned} \tag{7.11.5}$$

(b) 我们将幂指数展开成

$$\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\boldsymbol{n} \cdot \sigma\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\boldsymbol{n} \cdot \sigma\right)^n \tag{7.11.6}$$

注意到

$$(\boldsymbol{n} \cdot \sigma)^n = \begin{cases} 1, & n \text{ 为偶数} \\ \boldsymbol{n} \cdot \sigma, & n \text{ 为奇数} \end{cases}, \quad (-\mathrm{i})^n = \begin{cases} 1, & n \text{ 为偶数} \\ (-\mathrm{i})(-1)^{(n-1)/2}, & n \text{ 为奇数} \end{cases}$$

我们得到

$$\begin{aligned}\exp\left(\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\boldsymbol{n} \cdot \sigma\right) &= \sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{(2n)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n}\mathbf{1}\right] - \sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{1}{(2n+1)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n+1}(\boldsymbol{n} \cdot \sigma)\right] \\ &= \mathbf{1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n} - \mathrm{i}\boldsymbol{n} \cdot \sigma\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n+1}\end{aligned} \tag{7.11.7}$$

利用已知的展开式

$$\cos\alpha = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^{2n}}{(2n)!}, \quad \sin\alpha = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\alpha^{2n+1}$$

最后,我们得到

$$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\theta}{2}\boldsymbol{n} \cdot \sigma\right) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{1} - \mathrm{i}\boldsymbol{n} \cdot \sigma\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{7.11.8}$$

**7.12** 考虑 $S_n$ 的本征态矢量,即自旋在 $\boldsymbol{n}$ 方向的分量,这里 $\boldsymbol{n}$ 是单位矢量

$$\boldsymbol{n} = \hat{x}\sin\theta\cos\phi + \hat{y}\sin\theta\sin\phi + \hat{z}\cos\theta \tag{7.12.1}$$

求旋转算符 $U_R$,这里

$$U_R\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \left|+\frac{1}{2}\right\rangle', \quad U_R\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \left|-\frac{1}{2}\right\rangle' \tag{7.12.2}$$

**解答** $\left|+\frac{1}{2}\right\rangle$和$\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$是 $S_z$ 本征态标准基;$\left|+\frac{1}{2}\right\rangle'$和$\left|-\frac{1}{2}\right\rangle'$分别是 $S_n$ 的属于本征值 $+\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 的本征态矢量.考虑到

$$\begin{cases}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle' = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\left|+\frac{1}{2}\right\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|-\frac{1}{2}\right\rangle' = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\end{cases} \tag{7.12.3}$$

我们取$\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix}1\\n\end{pmatrix}$和$\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$,于是

$$\left|+\frac{1}{2}\right\rangle' = \begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\end{pmatrix}, \quad \left|-\frac{1}{2}\right\rangle' = \begin{pmatrix}-\sin(\theta/2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\\ \cos(\theta/2)\end{pmatrix} \tag{7.12.4}$$

假设 $U_R$ 的矩阵表示是 $U_R = \begin{pmatrix}a & b\\c & d\end{pmatrix}$;这样条件(7.12.2)可以写为

$$\begin{pmatrix}a & b\\c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\end{pmatrix} \tag{7.12.5}$$

同样，对 $U_R|-\frac{1}{2}\rangle=|-\frac{1}{2}\rangle'$，我们得到 $\begin{pmatrix}b\\d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\sin(\theta/2)e^{-i\phi}\\\cos(\theta/2)\end{pmatrix}$；最后，我们得到

$$U_R=\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos(\theta/2)&-\sin(\theta/2)e^{-i\phi}\\\sin(\theta/2)e^{i\phi}&\cos(\theta/2)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos(\theta/2)&0\\0&\cos(\theta/2)\end{pmatrix}$$

$$+\begin{pmatrix}0&-\sin(\theta/2)\cos\phi\\\sin(\theta/2)\cos\phi&0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&+\sin(\theta/2)\sin\phi\\\sin(\theta/2)\sin\phi&0\end{pmatrix}$$

$$=\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{1}-i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(\cos\phi)\sigma_y-i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(-\sin\phi)\sigma_x$$

$$\equiv\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{1}-i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(\hat{u}\cdot\sigma)\tag{7.12.6}$$

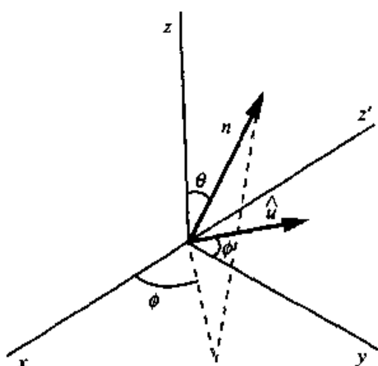



图 7-3

这里 $\hat{u}=\hat{x}\sin\phi+\hat{y}\cos\phi$（图 7-3），注意到 $\hat{u}=\frac{\hat{z}\times\boldsymbol{n}}{|\hat{z}\times\boldsymbol{n}|}$，于是

$$\hat{z}\times\boldsymbol{n}=\begin{vmatrix}\hat{x}&\hat{y}&\hat{z}\\0&0&1\\\sin\theta\cos\phi&\sin\theta\sin\phi&\cos\theta\end{vmatrix}$$

$$=-\hat{x}\sin\theta\sin\phi+\hat{y}\sin\theta\cos\phi$$

$$\Rightarrow|\hat{z}\times\boldsymbol{n}|=\sin\theta\tag{7.12.7}$$

在问题 7.11 的(b)中，我们曾得到结果

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{1}-i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(\hat{u}\cdot\boldsymbol{S})=\exp\left(-\frac{i\theta}{\hbar}\hat{u}\cdot\boldsymbol{S}\right)\tag{7.12.8}$$

于是，可以得到结果，旋转算符是

$$U_R=\exp\left(-\frac{i\theta}{\hbar}\hat{u}\cdot\boldsymbol{S}\right)\tag{7.12.9}$$

这里 $\hat{u}$ 是系统旋转轴方向的单位矢量，$\hat{u}=\frac{\hat{z}\times\boldsymbol{n}}{|\hat{z}\times\boldsymbol{n}|}$，$\boldsymbol{n}$ 是新的 $z$ 轴方向的单位矢量，$\theta$ 是新老 $z$ 轴之间的夹角.

## 补充习题

**7.13** 证明 $\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=\mathbf{1}$，这里 $\mathbf{1}$ 是 2×2 单位矩阵.

**7.14** 计算反对易关系 $[\sigma_i,\sigma_j]_+$，这里我们定义 $[\hat{A},\hat{B}]_+=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$.

**7.15** 证明算符 $S^2=S_x^2+S_y^2+S_z^2$ 在 $S_z$ 和 $S_y$ 共同本征态矢量的基下的矩阵是对角化的.

**7.16** 对自旋量 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\phi/2}|+\frac{1}{2}\rangle+e^{-i\phi/2}|-\frac{1}{2}\rangle\right)$ 计算 $\langle S_i\rangle$ 和 $\Delta S_i$ 的值.

**答案** $\langle S_x\rangle=\frac{\hbar}{2}\cos\phi,\Delta S_x=\frac{\hbar}{2}\sin\phi;\langle S_y\rangle=-\frac{\hbar}{2}\cos\phi,\Delta S_y=\frac{\hbar}{2}\cos\phi;\langle S_z\rangle=0,\Delta S_z=\frac{\hbar}{2}$.

**7.17** $S_z$ 在确定基下的矩阵表示是 $S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$，求 $S_y$ 和 $S_x$ 的基与矩阵表示.

**答案** $|+\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z+|-\frac{1}{2}\rangle_z\right);|-\frac{1}{2}\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z-|-\frac{1}{2}\rangle_z\right);S_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix};$
$S_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$.

**7.18** 考虑转动算符

$$U_R(\theta,\hat{u})=\exp\left(\frac{i\theta}{\hbar}\hat{u}\cdot\boldsymbol{S}\right)=\exp\left(\frac{i\theta}{2}\hat{u}\cdot\sigma\right)\tag{7.18.1}$$

用旋转 $S_z$ 本征态矢的方法，求 $S_x$ 和 $S_y$ 用标准基表示的本征态矢.

**答案**

$$|+\frac{1}{2}\rangle_x = U_R\left(\theta=\frac{\pi}{2},\hat{u}=\hat{y}\right)|+\frac{1}{2}\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z + |-\frac{1}{2}\rangle_z\right)$$

$$|-\frac{1}{2}\rangle_x = U_R\left(\theta=\frac{\pi}{2},\hat{u}=\hat{y}\right)|-\frac{1}{2}\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z - |-\frac{1}{2}\rangle_z\right)$$

$$|+\frac{1}{2}\rangle_y = U_R\left(\theta=\frac{\pi}{2},\hat{u}=-\hat{x}\right)|+\frac{1}{2}\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\mathrm{i}\,|+\frac{1}{2}\rangle_z + |-\frac{1}{2}\rangle_z\right)$$

$$|-\frac{1}{2}\rangle_y = U_R\left(\theta=\frac{\pi}{2},\hat{u}=-\hat{x}\right)|-\frac{1}{2}\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\frac{1}{2}\rangle_z + \mathrm{i}\,|-\frac{1}{2}\rangle_z\right)$$

# 第八章 类氢原子

## 8.1 有心势场中的粒子

质量为 $M$ 的粒子置于有心势场 $V(r)$ 中,其哈密顿量是

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r) \tag{8.1}$$

这里拉普拉斯算符在球坐标的表达式为

$$\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{8.2}$$

将上式和第六章中导出的算符 $\boldsymbol{L}^2$ 的表达式做比较,我们看到 $H$ 可以写为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2Mr^2}\boldsymbol{L}^2 + V(r) \tag{8.3}$$

$\boldsymbol{L}$ 的三个分量和 $\boldsymbol{L}^2$ 对易,所以根据(8.3),它们也和 $H$ 对易:

$$[H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = 0 \tag{8.4}$$

现在,我们可以解三个本征值方程

$$H\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.5}$$

$$\boldsymbol{L}^2\psi(r,\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.6}$$

$$L_z\psi(r,\theta,\phi) = m\hbar\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.7}$$

以确定粒子的态,这些态是 $H$、$\boldsymbol{L}^2$ 和 $L_z$ 的本征函数(这里我们使用第六章的符号表示法),分离变量(参看问题 8.1),我们得到

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{8.8}$$

这里 $Y_l^m$ 是球谐函数,$R_{nl}(r)$ 是径向函数(它不依赖于量子数 $m$),因为 $Y_l^m(\theta,\phi)$ 是用定义

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}(Y^{m'}_{l'})^*(Y_l^m)\sin\theta\,d\theta\,d\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{8.9}$$

归一化的,所以 $R_{nl}(r)$ 的归一化条件是

$$\int_0^{\infty} r^2 |R(r)|^2 dr = 1 \tag{8.10}$$

根据问题 8.1,$R_{nl}(r)$ 满足径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} + V(r)\right]R_{nl}(r) = ER_{nl}(r) \tag{8.11}$$

为化简方程,将 $R_{nl}(r)$ 写成

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}U_{nl}(r) \tag{8.12}$$

由此,我们得到

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}+V(r)\right]U_{nl}(r)=EU_{nl}(r) \tag{8.13}$$

方程(8.13)和质量为 $M$ 的粒子在有效势场 $V_{\mathrm{eff}}(r)$中运动的一维问题相似,这里

$$V_{\mathrm{eff}}(r)=V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \tag{8.14}$$

对方位角部分我们有方程

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)=m\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi) \tag{8.15}$$

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)=l(l+1)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi) \tag{8.16}$$

## 8.2 两个相互作用的粒子

考虑质量为 $m_1$ 和 $m_2$、位置为 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 的无自旋粒子构成的体系.我们假设势能仅依赖两粒子之间的距离,为 $V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$,如果我们采用质心坐标,研究两粒子的运动就变得简单了.

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{cm}}=\frac{m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1+m_2} \tag{8.17}$$

而相对坐标

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2 \tag{8.18}$$

我们可以导出方程(参看问题 8.2)

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla^2_{\mathrm{cm}}\phi(\boldsymbol{r}_{\mathrm{cm}})=E_{\mathrm{cm}}\phi(\boldsymbol{r}_{\mathrm{cm}}) \tag{8.19}$$

和

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\chi(\boldsymbol{r})=E_r\chi(\boldsymbol{r}) \tag{8.20}$$

这里 $\mu$ 是两个粒子的折合质量

$$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \tag{8.21}$$

从方程(8.19),我们得到结论:粒子质心的行为好像质量为 $m_1+m_2$、能量为 $E_{\mathrm{cm}}$的自由粒子.两个粒子的相对运动由方程(8.20)确定,和质量为 $\mu$ 的粒子置于势场 $V(\boldsymbol{r})$中的运动相似.

## 8.3 氢原子

氢原子由质子和电子组成,质子质量 $m_{\mathrm{p}}=1.67\times10^{-27}\mathrm{kg}$、带电荷 $e=1.6\times10^{-19}\mathrm{C}$,而电子质量 $m_{\mathrm{e}}=0.91\times10^{-30}\mathrm{kg}$、带电荷 $-e$,这两粒子之间的相互作用本质上是静电作用,势能是

$$V(r)=-\frac{e^2}{r} \tag{8.22}$$

这里 $r$ 是两粒子之间的距离.因为 $m_{\mathrm{p}}$ 比 $m_{\mathrm{e}}$ 大那么多,以致于系统的折合质量非常接近于 $m_{\mathrm{e}}$:

$$\mu=\frac{m_{\mathrm{e}}m_{\mathrm{p}}}{m_{\mathrm{e}}+m_{\mathrm{p}}}\cong m_{\mathrm{e}}\left(1-\frac{m_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{p}}}\right) \tag{8.23}$$

这意味着系统的质心实际上处于质子的位置,相对运动在很好的近似程度上等同于电子的运动.

根据方程(8.8)和(8.12),我们可以将体系的态写成如下的形式

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=\frac{1}{r}U_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{8.24}$$

我们引入玻尔半径 $a_0$,它刻划原子的线度.

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\cong 0.52\text{Å} \tag{8.25}$$

以及氢原子的电离能

$$E_1=\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cong 13.6\text{eV} \tag{8.26}$$

为求解氢原子的径向方程,我们定义 $\rho=r/a_0$ 和 $\lambda_{kl}=\sqrt{-E_{kl}/E_1}$,于是径向方程(8.13)变为

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}+\frac{2}{\rho}-\lambda_{kl}^2\right]U_{kl}(\rho)=0 \tag{8.27}$$

这里,我们使用哑标 $k$ 而不是 $n(n=k+l)$. 径向方程的求解借助如下的函数变换(参看问题8.1):

$$U_{kl}(\rho)=e^{-\rho\lambda_{kl}}\xi_{kl}(\rho) \tag{8.28}$$

并将 $\xi_{kl}$ 展成 $\rho$ 的幂指数

$$\xi_{kl}(\rho)=\rho^s\sum_{q=0}^{\infty}C_q\rho^q \tag{8.29}$$

系数 $C_q$ 可从递推关系得到(参看问题8.1)

$$C_q=(-1)^q\left(\frac{2}{k+1}\right)^q\frac{(k-1)!}{(k-q-1)!}\frac{(2l+1)!}{q!(q+2l+1)}C_0 \tag{8.30}$$

$R_{nl}(\rho)$的解可以写成形式

$$R_{nl}(\rho)=-\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}}e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \tag{8.31}$$

这里 $L_p^q(\rho)$是连带勒让德多项式(详细情况,参看数学附录),径向函数的一些例子是

$$R_{n=1,l=0}(r)=2(a_0)^{-3/2}e^{-r/a_0} \tag{8.32}$$

$$R_{n=2,l=0}(r)=2(2a_0)^{-3/2}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0} \tag{8.33}$$

$$R_{n=2,l=1}(r)=(2a_0)^{-3/2}\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0} \tag{8.34}$$

## 8.4 氢原子的能级

对于固定的 $l$,存在无限多的可能能量值

$$E_{kl}\propto-\frac{1}{(k+l)^2},\quad k=1,2,3,\cdots \tag{8.35}$$

它们的每一个至少是$(2l+1)$一重简并. 这种根本性的简并起因于径向方程和量子数 $n$ 无关. 有些能量值表现偶然简并,这里 $E_{kl}$ 的确不是分别地依赖于$k$ 和$l$,但依赖于它们之和. 我

们令 $n=k+l$,于是

$$E_n=-\frac{1}{n^2}E_1=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}=-\frac{1}{n^2}\times 13.6\text{eV} \tag{8.36}$$

通常说用 $n$ 刻画的壳层包括 $n$ 个分壳层,每一个相应于 $l$ 的一个值

$$l=0,1,2,\cdots,n-1 \tag{8.37}$$

每一个分层容纳 $2l+1$ 个不同的态,相应于 $m$ 的可能值

$$m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l \tag{8.38}$$

能级 $E_n$ 的总简并度是

$$g_n=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=\frac{2(n-1)n}{2}+n=n^2 \tag{8.39}$$

如果记及电子的自旋(它可能处于两个可能取向的一个),那么数 $g_n$ 应当乘以 2.

考虑到历史的原因(在研究原于光谱的年代,将观测到的谱线用经验的方法分类),将 $l$ 所取的不同值和拉丁字母联系如下:

$$\begin{aligned}(l=0)&\leftrightarrow \text{s}\\(l=1)&\leftrightarrow \text{p}\\(l=2)&\leftrightarrow \text{d}\\(l=3)&\leftrightarrow \text{f}\\(l=4)&\leftrightarrow \text{g}\\\vdots\quad&\quad\vdots\end{aligned}$$

按字母表顺序 (8.40)

## 8.5 平均值表达式

在下表中,我们收入了几个 $r^k$ 的平均值表达式,它们在许多问题中是有用的.

$$\langle r^k\rangle\equiv\int_0^\infty r^{k+2}[R_{nl}(r)]^2\mathrm{d}r \tag{8.41}$$

$$\langle r\rangle=\frac{a_0}{2}[3n^2-l(l+1)] \tag{8.42}$$

$$\langle r^2\rangle=\frac{a_0^2n^2}{2}[5n^2+1-3l(l+1)] \tag{8.43}$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle=\frac{1}{a_0n^2} \tag{8.44}$$

和

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle=\frac{1}{a_0^2n^3(l+1/2)} \tag{8.45}$$

## 8.6 类氢原子

上面得到的结果,起源于具有相互作用能的两粒子体系的计算,这种相互作用能和两粒子的距离成反比.有许多物理体系满足这些条件:氘、氚仅含有一个电子的离子、介子原子、电子

偶素等.上述结果能适用于这些系统,只要在计算中适当选择引入的常数.例如,如果核的电荷数是 $Z$,那么在所有计算中 $e^2$ 换为 $Ze^2$.

## 例题解答

**8.1** (a)写出有心势场中粒子的本征值方程,并将波函数分离变量,求出径向方程和两个方位角方程;(b)对氢原子的势场 $V(r)=-e^2/r$ 求解径向方程.

**解** (a) 考虑体系的哈密顿量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r)+\frac{L^2}{2\mu r^2}+V(r) \tag{8.1.1}$$

我们有下面的本征值方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r)+\frac{L^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.1.2}$$

三个可观测量 $H$、$L^2$ 和 $L_z$ 互易.于是可以求波函数 $\psi(r,\theta,\phi)$,它也是 $L^2$ 和 $L_z$ 的本征函数.我们有下面的微分方程组:

$$H\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.1.3}$$

$$L^2\psi(r,\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.1.4}$$

和

$$L_z\psi(r,\theta,\phi)=m\hbar\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.1.5}$$

注意,对 $\psi(r,\theta,\phi)$,我们有三个微分方程,它是三个变量的函数,因为

$$L^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{8.1.6}$$

和 $L_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$(参看第六章),(8.1.4)和(8.1.5)可以用下面的方程代替

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\psi(r,\theta,\phi)=l(l+1)\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.1.7}$$

和

$$-\mathrm{i}\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi}=m\psi(r,\theta,\phi) \tag{8.1.8}$$

这些方程在 $l$ 和 $m$ 固定时的解 $\psi(r,\theta,\phi)$一定是 $r$ 的函数和球谐函数 $Y_l^m(\theta,\phi)$的乘积

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{8.1.9}$$

将(8.1.9)代入(8.1.2)、(8.1.7)和(8.1.8),我们得到

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]R(r)=ER(r) \tag{8.1.10}$$

$$\left[-\frac{\partial}{\partial\theta^2}+\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y_l^m(\theta,\phi)=l(l+1)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{8.1.11}$$

和

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta,\phi)=mY_l^m(\theta,\phi) \tag{8.1.12}$$

方程(8.1.10)是径向方程;(8.1.11)和(8.1.12)是角方程.从(8.1.12)我们可以断定 $Y_l^m(\theta,\phi)$对 $\phi$ 的依赖关系形为 $e^{im\phi}$.这样 $Y_l^m(\theta,\phi)=G_l^m(\theta)e^{im\phi}$,这里 $G_l^m(\theta)$仅是 $\theta$ 的函数.

(b) 我们将径向方程写成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]R_{kl}(r)=E_{kl}R_{kl}(r) \tag{8.1.13}$$

的形式，引入函数 $U_{kl}(r)=rR_{kl}(r)$，得到

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]u_{kl}(r)=E_{kl}u_{kl}(r) \tag{8.1.14}$$

我们定义有效势能

$$V_{eff}=V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \tag{8.1.15}$$

我们可以将(8.1.14)看作是一维问题，即质量为 $\mu$ 的粒子在有效势场 $V_{eff}$ 中运动，惟一不同之处是设 $r$ 为非负值. 欲将(8.1.14)表示成无量纲形式，我们定义

$$E_1=\frac{\mu e^4}{2\hbar^2},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2},\quad \lambda_{kl}=\sqrt{\frac{-E_{kl}}{E_1}},\quad \rho=\frac{r}{a_0} \tag{8.1.16}$$

方程(8.1.14)变成

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}+\frac{2}{\rho}-\lambda_{kl}^2\right]u_{kl}(\rho)=0 \tag{8.1.17}$$

我们定义 $u_{kl}(\rho)=e^{-\rho\lambda_{kl}}\xi_{kl}(\rho)$，得到方程

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}-2\lambda_{kl}\frac{d}{d\rho}+\left(\frac{2}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right]\xi_{kl}(\rho)=0 \tag{8.1.18}$$

具有边界条件 $\xi_{kl}(0)=0$. 将 $\xi_{kl}(\rho)$ 展开成 $\rho$ 的幂级数给出 $\xi_{kl}(\rho)=\rho^s\sum_{q=0}^{\infty}C_q\rho^q$，这里 $C_0$ 是第一个非零系数，于是

$$\frac{d\xi_{kl}(\rho)}{d\rho}=\sum_{q=0}^{\infty}(q+s)C_q\rho^{q+s-1} \tag{8.1.19}$$

和

$$\frac{d\xi_{kl}(\rho)}{d\rho^2}=\sum_{q=0}^{\infty}(q+s)(q+s-1)C_q\rho^{q+s-2} \tag{8.1.20}$$

将(8.1.19)和(8.1.20)代入(8.1.18). 我们在方程左边得到幂级数，在右边为零；这样 $\rho$ 的各次幂的系数为零. 我们设方程(8.1.13)的解在原点的行为同 $r^s$

$$R_{kl}(r)\underset{r\to0}{\sim}Cr^s \tag{8.1.21}$$

将(8.1.21)代入到(8.1.13)得到

$$l(l+1)-s(s+1)=0 \tag{8.1.22}$$

如果 $s=l$ 或 $s=-(l+1)$，上式成立. 因此，对给定 $E_{kl}$ 值，方程(8.1.13)有两个线性无关的解. 解在原点的行为分别为 $r^l$ 和 $1/r^{l+1}$，后一个解必须舍弃，因为它表明，当 $r=0$，$1/r^{l+1}Y_l^m(\theta,\phi)$ 不是本征值方程(8.1.2)的解. 这就导致(8.1.13)的解对所有 $l$ 在原点都趋向零，因为 $u_{kl}(r)\underset{r\to0}{\sim}Cr^{l+1}$，所以条件 $u_{kl}(0)=0$ 应当加到方程(8.1.13)上，在我们得到的幂级数中，我们取出最低项并令其系数为零，就得到

$$[-l(l+1)+s(s-1)]C_0=0 \tag{8.1.23}$$

因为 $C_0\neq0$，我们有 $s=-l$ 或 $s=l+1$；下一步，我们置一般项 $\rho^{q+s-2}$ 的系数为零(对 $s=l+1$)并得到下面的递推关系：

$$q(q+2l+1)C_q=2[(q+l)\lambda_{kl}-1]C_{q-1} \tag{8.1.24}$$

于是，假设 $C_0$ 为已知，我们就可以计算 $C_1,C_2,\cdots$；因为当 $q\to\infty$ 时，$C_q/C_{q-1}\to0$，所以对所有的 $\rho$ 级数都是收敛的，可以证明

$$C_q=(-1)^q\left(\frac{2}{k+1}\right)^q\frac{(k-1)!}{(k-q-1)!}\frac{(2l+1)!}{(q+2l+1)!}C_0 \tag{8.1.25}$$

这里 $C_0$ 可以通过归一化条件

$$\int_0^{\infty}r^2|R_{kl}(r)|^2dr=\int_0^{\infty}|u_{kl}(r)|^2dr \tag{8.1.26}$$

来确定.

**8.2** 一个氢原子可以看作是两个点电荷粒子——质子和电子构成的体系,它们之间具有库仑相互作用势,写出这样一个体系的薛定谔方程,并将方程分成两部分:一部分描述质心的运动,而另一部分描述质子和电子的相对运动.

**解** 质子和电子的薛定谔方程是

$$\left(-\frac{\hbar}{2}\left[\frac{\nabla_1^2}{m_p}+\frac{\nabla_2^2}{m_e}\right]+V(r)\right)\psi = E\psi \tag{8.2.1}$$

这里的 $m_e$ 和 $m_p$ 分别表示质子和电子的质量,指标 1 和 2 分别表示质子和电子,粒子间的势是

$$V(r) = V(r_1 - r_2) = -Ze^2\frac{1}{\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2+(z_1-z_2)^2}} = -\frac{Ze^2}{r} \tag{8.2.2}$$

定义相对坐标

$$x_r = x_2 - x_1,\quad y_r = y_2 - y_1,\quad z_r = z_2 - z_1 \tag{8.2.3}$$

质心的坐标 $r_{cm}=\frac{m_p r_1 + m_e r_2}{m_p + m_e}$. 对于微分算符,我们有

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_p}{m_p+m_e}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x_{cm}^2} - \frac{2m_p}{m_p+m_e}\frac{\partial^2}{\partial x_{cm}\partial x_r} + \frac{\partial^2}{\partial x_r^2} \tag{8.2.4}$$

和

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left(\frac{m_e}{m_p+m_e}\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x_{cm}^2} + \frac{2m_e}{m_p+m_e}\frac{\partial^2}{\partial x_r\partial x_{cm}} + \frac{\partial^2}{\partial x_r^2} \tag{8.2.5}$$

同样的关系对于 $\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}$、$\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}$、$\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$ 和 $\frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$ 也是成立的,将这些算符代入(8.2.1),我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left(\left[\frac{1}{m_p+m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_{cm}^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_{cm}^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_{cm}^2}\right)+\frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_r^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_r^2}\right)\right]-\frac{Ze^2}{r}\right)\psi = E\psi \tag{8.2.6}$$

这里 $\mu$ 是折合质量,$\mu=\frac{m_p m_e}{m_p+m_e}$,我们将波函数 $\psi$ 分成两部分. 第一部分仅依赖于质心坐标,而第二部分仅依赖于相对坐标,$\psi=\phi(r_{cm})\chi(r_r)$代入 8.26,我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{2\phi(r_{cm})}\left[\frac{1}{m_p+m_e}\nabla_{cm}^2\phi(r_{cm})\right] = \frac{\hbar^2}{2\chi(r_r)}\left[\frac{1}{\mu}\nabla_r^2+\frac{Ze^2}{r}+E\right]\chi(r_r) \tag{8.2.7}$$

因为要使(8.2.7)对 $r_{cm}$ 和 $r_c$ 的所有值都成立,方程的每一边必须等于常数. 所以我们得到两个分离的方程

$$\left[\frac{\hbar^2}{2(m_p+m_e)}\nabla_{cm}^2 + E_{cm})\right]\phi(r_{cm}) = 0 \tag{8.2.8}$$

和

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2+\frac{Ze^2}{r}+E_r\right)\chi(r_r) = 0 \tag{8.2.9}$$

$E_{cm}$是质心系的平动动能,$E_r$ 是相对动能,显然我们有 $E=E_{cm}+E_r$. 要求得氢原子中电子的波函数,必须解方程(8.2.9)(参看问题 8.1).

**8.3** 在类氢原子中,电子的波函数是 $\psi(r)=Ce^{-r/a}$,这里 $a=a_0/Z$;$a_0=0.5Å$ 是玻尔半径(核电荷是 $Ze$,原子仅含一个电子). (a)计算归一化常数;(b)如果核数是 $A=173$ 和 $Z=70$,电子在核内的概率是多大? 设核的半径是 $1.2\times A^{1/3}$fm;(c)电子在区域 $x,y,z>0$ 的概率是多大?

**解** (a) 归一化条件是 $\iiint\psi^*\psi d^3r = 1$. 代入波函数 $\psi$ 我们有

$$C^2\int_0^\infty r^2e^{-2r/a}dr\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^\pi\sin\theta d\theta = 4\pi C^2\int_0^\infty r^2e^{-2r/c}dr = 1 \tag{8.3.1}$$

(8.3.1)中的积分是

$$\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \Gamma(3) = \left(\frac{a}{2}\right)^3 2! = \frac{a^3}{4} \tag{8.3.2}$$

所以,$C = \left(\frac{1}{4\pi}\frac{4}{a^3}\right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$.

(b) 用 $R$ 表示核的半径,在核内找到电子的概率是

$$P = \int_0^R r^2 \mid \psi(r) \mid^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta = 4\pi C^2 \int_0^R r^2 e^{-2r/a} dr \tag{8.3.3}$$

因为 $R$ 远远小于 $a$($R \sim 1\text{fm} = 10^{-5}$Å 而 $a \sim$ Å),在核内我们可以将 $|\psi|^2$ 当成常数,即 $e^{-2r/a} \sim e^{-2R/a} \sim 1$. 于是,我们有

$$P = \frac{4}{a^3}\int_0^R r^2 dr = \frac{4}{3}\left(\frac{R}{a}\right)^3 = \frac{4}{3}\left(\frac{Zr_0}{a_0}\right)^3 A = 1.1 \times 10^{-6} \quad (r_0 = 1.2\text{fm}) \tag{8.3.4}$$

(c) 波函数与 $\theta$ 和 $\phi$ 两者均无关(它是对称函数),于是在 1/8 空间(即在区间 $x, y, z > 0$ 内)找到粒子的概率就是 1/8.

**8.4** 计算电子处于态 1s、2s 和 2p 时,氢原子的归一化动量分布.

**解** 归一化动量分布是 $|\psi(\boldsymbol{p})|^2$,这里 $\psi(\boldsymbol{p})$ 是动量表象中的波函数. 为求出 $\psi(\boldsymbol{p})$,我们作波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的傅里叶变换

$$\psi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \psi(\boldsymbol{r}) d^3 r \tag{8.4.1}$$

我们将 $\psi_{1s}(\boldsymbol{r})$、$\psi_{2s}(\boldsymbol{r})$ 和 $\psi_{2p}(\boldsymbol{r})$ 的具体表达式代入(8.4.1),得到

$$\begin{cases} \psi_{1s}(p) = \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \dfrac{1}{[(p^2a^2/\hbar^2 + 1)]^2} \\ |\psi_{1s}(p)|^2 = \dfrac{1}{\pi^2}\left(\dfrac{2a}{\hbar}\right) \dfrac{1}{[(p^2a^2/\hbar^2 + 1)]^4} \end{cases} \tag{8.4.2}$$

和

$$\begin{cases} \psi_{2s}(p) = \dfrac{1}{2\pi}\left(\dfrac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \dfrac{1}{[(p^2a^2/\hbar^2 + 1/4)]^3}\left(\dfrac{p^2a^2}{\hbar^2} - \dfrac{1}{4}\right) \\ |\psi_{2s}(p)|^2 = \dfrac{1}{(2\pi)^2}\left(\dfrac{2a}{\hbar}\right)^3 \dfrac{1}{[(p^2a^2/\hbar^2 + 1/4)]^6}\left(\dfrac{p^2a^2}{\hbar^2} - \dfrac{1}{4}\right)^2 \end{cases} \tag{8.4.3}$$

对于态 2p,有三个不同的本征函数:$m = -1, 0, 1$,于是

$$m = 0: \begin{cases} \psi_{2p}(p) = -i\dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{a}{\hbar}\right)^{3/2} a \dfrac{ap_z}{\hbar[(p^2a^2/\hbar^2 + 1/4)]^3} \\ |\psi_{2p}(p)|^2 = \dfrac{1}{\pi^2}\left(\dfrac{a}{\hbar}\right)^3 \dfrac{(ap_z)^2}{\hbar^2[(p^2a^2/\hbar^2 + 1/4)]^6} \end{cases} \tag{8.4.4}$$

和

$$m = \pm 1: \begin{cases} \psi_{2p}(p) = -i\dfrac{1}{\pi\sqrt{2}}\left(\dfrac{a}{\hbar}\right)^{3/2} \dfrac{a(p_x \pm ip_y)}{\hbar[(p^2a^2/\hbar^2 + 1/4)]^3} \\ |\psi_{2p}(p)|^2 = \dfrac{1}{2\pi^2}\left(\dfrac{a}{\hbar}\right)^3 \dfrac{a^2(p_x \pm ip_y)^2}{\hbar^2[(p^2a^2/\hbar^2 + 1/4)]^6} \end{cases} \tag{8.4.5}$$

**8.5** 考虑类氢原子的波函数

$$\psi(r, \theta) = \frac{1}{81}\sqrt{\frac{2}{\pi}} Z^{3/2}(6 - Zr)Zr e^{-Zr/3}\cos\theta \tag{8.5.1}$$

其中 $r$ 是以 $a_0$ 为单位表示的. (a)求量子数 $n$、$l$ 和 $m$ 的相应值;(b)由 $\psi(r, \theta)$ 出发构造另一个具有相同 $n$ 和 $l$ 值,但具有不同的磁量子数 $m+1$ 的波函数;(c)当一个电子处于态 $\psi$ 且 $Z = 1$ 时,计算 $r$ 的最概然值.

**解** (a) 考虑波函数 $\psi(r,\theta)$ 中的幂指数因子,其形式为 $\exp(-\sqrt{E}r)$. 因为 $E=-Z^2/n^2$,我们断定 $n=3$. 角量子数 $l$ 可用两种方法确定;一是考察乘以类氢原子波函数中的勒让德多项式的因子 $r^l$,二是进行如下的运算:

$$L^2\psi(r,\theta)=L^2f(r)\cos\theta=f(r)\left[-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\cos\theta\right)\right]$$

$$=f(r)\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}(\sin\theta)^2\right]=2f(r)\cos\theta=l(l+1)\psi(r,\theta)\qquad(8.5.2)$$

于是,$l=1$,欲求磁量子数,我们利用算符 $L_z$

$$L_z\psi(r,\theta)=-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}[f(r)\cos\theta]=0=m\psi(r,\theta)\qquad(8.5.3)$$

这样,就有 $m=0$.

(b) 为生成一个新的具有磁量子数 $m+1$ 的类氢原子波函数,我们使用计算符 $L_+$(参看第六章). 因为 $l=1$ 和 $m=0$,我们有

$$L_+\psi_m=\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\psi_{m+1}=\sqrt{2}\psi_{m+1}\qquad(8.5.4)$$

我们使用 $L_+$ 的微分表示

$$L_+=L_x+\mathrm{i}L_y=\mathrm{i}(\sin\phi-\mathrm{i}\cos\phi)\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}(\cos\phi+\mathrm{i}\sin\phi)\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\qquad(8.5.5)$$

并得到

$$L_+\psi_{m=0}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\frac{\partial}{\partial\theta}f(r)\cos\theta=-\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\phi}f(r)\sin\theta\qquad(8.5.6)$$

联立(8.5.4)和(8.5.6),我们得到

$$\psi_{m+1}=-\frac{1}{\sqrt{2}}f(r)\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}=-\frac{1}{81\sqrt{\pi}}Z^{3/2}(6-Zr)Zr\mathrm{e}^{-Zr/3}\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\qquad(8.5.7)$$

(c) 当 $(r\psi)^2$ 取最大值时,得到 $r$ 的最概然值,对于 $Z=1$,我们有

$$\frac{\partial(r\psi)}{\partial r}=0=\frac{\partial}{\partial r}(6-r)r^2\mathrm{e}^{-r/3}=\mathrm{e}^{-r/3}\left(\frac{r^3}{3}-5r^2+12r\right)\qquad(8.5.8)$$

我们得到二次方程 $r^2-15r+36=0$;它的根是 $r=12$ 和 $r=3$. 计算 $|r\psi|$ 的值,我们发现当 $r=12$ 时,其值最大,所以 $r$ 的最概然值是 $12a$.

**8.6** **考虑有心场中的粒子并假设系统有离散谱. 每一个轨道量子数 $l$ 具有最小能量值. 证明该最小值随 $l$ 的增加而增加.**

**证** 首先,我们写出体系的哈密顿量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\qquad(8.6.1)$$

利用 $H_1=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+V(r)$,我们有

$$H=H_1+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\qquad(8.6.2)$$

在态 $l$,能量的最小值是

$$E_{\min}^l=\int\psi_l^*\left[H_1+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi_l\mathrm{d}^3r\qquad(8.6.3)$$

在态 $l+1$,能量的最小值由下式给出:

$$E_{\min}^{l+1}=\int\psi_{l+1}^*\left[H_1+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(l+1)(l+2)}{r^2}\right]\psi_{l+1}\mathrm{d}^3r\qquad(8.6.4)$$

方程(8.6.4)可以写成下面形式:

$$E_{\min}^{l+1}=\int\psi_{l+1}^*\frac{\hbar^2}{m}\frac{(l+1)}{r^2}\psi_{l+1}\mathrm{d}^3r+\int\psi_{l+1}^*\left[H_1+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi_{l+1}\mathrm{d}^3r \tag{8.6.5}$$

因为$|\psi_{l+1}|^2$和$\frac{\hbar^2}{m}\frac{l+1}{r^2}$为正,方程(8.6.5)的第二项总为正.现在考虑(8.6.5)的第二项. $\psi_l$ 是哈密顿量 $H=H_1+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$的本征函数并对应于哈密顿量的最小本征值.这样

$$\int\psi_l^*\left[H_0+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi_l\mathrm{d}^3r<\int\psi_{l+1}^*\left[H_0+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi_{l+1}\mathrm{d}^3r \tag{8.6.6}$$

这就证明了 $E_{\min}^l<E_{\min}^{l+1}$.

**8.7** 写出两维氢原子的薛定谔方程.设势为$-e^2/r$,这里 $r=\sqrt{x^2+y^2}$.使用分离变量,求径向方程和角向方程、解角向方程、阐述刻画束缚态的量子数和体系的简并度.

**解** 考虑两维薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right]-\frac{e^2}{r}\psi=E\psi \tag{8.7.1}$$

做分离变量 $\psi=R(r)\Phi(\phi)$,我们得到角向方程

$$\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}=-m^2\Phi(\phi) \tag{8.7.2}$$

常数 $m$ 必须是整数,于是(8.7.2)的解是

$$\Phi_m(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi} \tag{8.7.3}$$

考虑径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\frac{\hbar^2m^2}{2mr^2}R(r)-\frac{e^2}{r}R(r)=ER(r) \tag{8.7.4}$$

每个态 $R_{n|m|}(r)$用主量子数 $n$ 和角量子数 $m$ 的绝对值刻画,系统的能量是 $E_{n|m|}$. $m\neq0$ 的各态是两重简并,$m=0$ 的态不是简并的.

**8.8** $\mu$子,除质量外,其基本性质和电子相同.

$$m_\mu=207m_e \tag{8.8.1}$$

一个 $\mu^+$子和一个电子形成的物理体系称为 $\mu$ 子素,$\mu$ 子素的行为像轻的氢同位素,静电吸引如同质子和电子.确定电离能和玻尔半径.

**解** 系统的折合质量是

$$\mu_\mu=\frac{m_em_\mu}{m_e+m_\mu}=\frac{207}{208}m_e=\left(1-\frac{1}{208}\right)m_e \tag{8.8.2}$$

玻尔半径是

$$a_0(\mu\text{子素})=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\cong a_0(H)\left(1+\frac{1}{200}\right) \tag{8.8.3}$$

这里 $a_0$(H)是氢原子的玻尔半径.电离能是

$$E_1(\mu\text{子素})=\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cong E_1(\mathrm{H})\left(1-\frac{1}{200}\right) \tag{8.8.4}$$

这里 $E_1(\mathrm{H})=13.6\mathrm{eV}$ 是氢原子的电离能. $\mu$ 子的研究是非常有趣的.两个粒子构成的体系不属于很强的核相互作用,后者无法用很高的精确度计算能级.

**8.9** 证明球谐函数有如下的关系:

$$\sum_{m=-l}^{m=+l}\mathrm{Y}_{lm}^*(\theta,\phi)\mathrm{Y}_{ml}(\theta,\phi)=\mathrm{const.} \tag{8.9.1}$$

使用勒让德多项式展开(参看数学附录):

$$P_l(\cos\gamma) = \sum_{m=-l}^{m=+l} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} P_l^{|m|}(\cos\theta_1) P_l^{|m|}(\cos\theta_2) e^{im(\phi_1-\phi_2)} \tag{8.9.2}$$

这里 $\gamma$ 是两个方向 $\theta_1,\phi_1$ 和 $\theta_2,\phi_2$ 之间的夹角.

**证** ☞　将球谐函数写成形式

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \frac{(-1)^{(m+|m|)/2}}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{8.9.3}$$

于是

$$\sum_{m=-l}^{m=+l} Y_{lm}^*(\theta,\phi) Y_{lm}(\theta,\phi) = \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^{m=+l} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} |P_l^{|m|}(\cos\theta)|^2 \tag{8.9.4}$$

在(8.9.2)中,我们令 $\theta_1=\theta_2=\theta$ 和 $\phi_1=\phi_2=\phi$ 并得到

$$P_l(\cos\gamma) = \sum_{m=-l}^{m=+l} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} |P_l^{|m|}(\cos\theta)|^2 = P_l(\cos 0) = 1 \tag{8.9.5}$$

将(8.9.5)代入(8.9.4),我们得到

$$\sum_{m=-l}^{m=+l} Y_{lm}^*(\theta,\phi) Y_{lm}(\theta,\phi) = \frac{2l+1}{4\pi} \tag{8.9.6}$$

因为 $(2l+1)/4\pi$ 是常数,证明完毕.

**8.10**　宇称算符定义成替换 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$(参看第四章).宇称算符怎样影响氢原子中电子的波函数?

**解** ☞　在氢原子中,我们可以用球坐标 $(r,\theta,\phi)$ 表示波函数.我们来确定宇称算符怎样影响这些坐标(参看图 8-1).

我们看到,在宇称算符 $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$ 下;$\theta \to \pi-\theta$ 和 $\phi \to \pi+\phi$.因为氢原子本征函数的径向部分仅依赖 $r$,我们断定宇称算符仅影响球谐函数部分.对球谐函数,我们有 $Y_l^l(\theta,\phi) = a_l(\sin\theta)^l e^{il\phi}$,于是

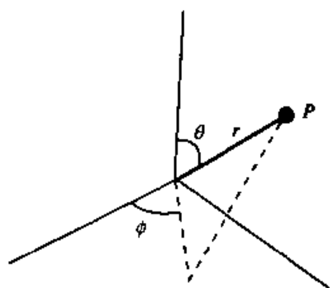



图 8-1

$$Y_l^l(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^l Y_l^l(\theta,\phi) \tag{8.10.1}$$

所以,在宇称算符下,

$$Y_l^l(\theta,\phi) \to (-1)^l Y_l^l(\theta,\phi) \tag{8.10.2}$$

更何况,因为 $\frac{\partial}{\partial\theta} \to -\frac{\partial}{\partial\theta}$ 和 $\frac{\partial}{\partial\phi} \to \frac{\partial}{\partial\phi}$,因此算符 $L_\pm$ 不受宇称算符的影响.因为,我们曾用算符 $L_-$ 作用于 $Y_l^l$,得到 $Y_l^m(\theta,\phi)$ 的具体表达式,所以,我们可以断言无须进一步计算,即有

$$Y_l^m(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^l Y_l^m(\theta,\phi) \tag{8.10.3}$$

换句话说,在宇称运算下

$$Y_l^m(\theta,\phi) \to (-1)^l Y_l^m(\theta,\phi) \tag{8.10.4}$$

## 补 充 习 题

**8.11**　氢原子处于态 $n=2, l=0$ 和 $m=0$.求电子半径 $r$ 值小于玻尔半径的概率.

**答案**　0.176.

**8.12**　在类氢原子中,电子处于态 $n$ 和 $l=n-1$,求 $r$ 的最概然值.

**答案**　$r=n^2/Z$　　以 $a_0$ 为单位.

**8.13**　证明:在氢原子中第 $n$ 壳层的简并度等于 $2n^2$.计及电子的自旋但不考虑质子的自旋.

**8.14**　氢原子 $2p$ 态的六个波函数是

$$m_l=+1, \qquad m_s=\pm\frac{1}{2}, \qquad \psi_{+1} = A\frac{re^{-r/2a_0}}{a_0}\sin\theta e^{i\phi}$$

$$m_l=0,\qquad m_s=\pm\frac{1}{2},\qquad \psi_0=B\frac{r\mathrm{e}^{-r/2a_0}}{a_0}\cos\theta$$

$$m_l=-1,\qquad m_s=\pm\frac{1}{2},\qquad \psi_{-1}=C\frac{r\mathrm{e}^{-r/2a_0}}{a_0}\sin\theta\mathrm{e}^{-i\phi}\tag{8.14.1}$$

这里 $a_0$ 是玻尔半径,$A$、$B$ 和 $C$ 是归一化常数.(a)计算 $A$、$B$ 和 $C$;(b)证明 $|\psi_m|^2$ 的和仅是 $r$ 的函数;(c)当 $m_l=0$ 求 $\langle r\rangle$.

**答案**　(a)$A=-\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}}$,　$B=\frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}$,　$C=\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}}$;(c)$\langle r\rangle=5a_0$.

**8.15**　考虑氢原子处于量子数为 $n$ 和 $l$ 的态,计算电子离开核的距离的均方差.注意,均方差定义为 $\sqrt{\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2}$.

**答案**　$-\frac{\sqrt{n^2(n+2)-l^2(l+1)^2}}{2}$.

**8.16**　在氢原子中,波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$描述质子和电子的相对运动.如果该系统的质心坐标是 $x=0,y=0$ 和 $z=0$.质子的概率密度是$\left(\frac{m+M}{m}\right)^2\left|\psi\left(\frac{m+M}{m}\boldsymbol{r}\right)\right|^2$.

**8.17**　对于两维类氢原子,薛定谔方程是$(-\nabla^2-2Z/r)\psi=E\psi$(用原子单位).用柱坐标求 $R(r)$和 $\Phi(\phi)$的方程.

**答案**　$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}=-m^2\Phi(\phi)$and $\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left(\frac{2Z}{r}-\frac{m^2}{r^2}+E\right)R(r)=0$.

**8.18**　考虑粒子处于球形阱 $V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$中,设角动量为零,求粒子的能量谱.

**答案**　能量谱由 $ka=n\pi-\arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}\right)$和 $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$给出,这些方程可以用图像法或数值法求解(参看第十二章).

# 第九章 电磁场中的粒子运动

## 9.1 电磁场及其有关的势

考虑一个电磁场,它由电场 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$和磁场$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$的值描述. 电场 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$和磁场$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$不是相互独立的,它们必须满足麦克斯韦方程. 这就可以引入一个标量势 $\varphi(\boldsymbol{r},t)$和矢量势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$,使得

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{9.1}$$

和

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{9.2}$$

应用麦克斯韦方程,可以证明,我们总可以求出 $\varphi$ 和$\boldsymbol{A}$. 但是,当 $\boldsymbol{E}$ 和$\boldsymbol{B}$ 给定时,不能惟一地确定 $\varphi$ 和$\boldsymbol{A}$. 当我们选定一组特定的势,我们就说我们选择了一个规范,从一组势$(\varphi,\boldsymbol{A})$,我们可以通过规范变换得到另一组势$(\varphi',\boldsymbol{A}')$

$$\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \tag{9.3}$$

和

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla f(\boldsymbol{r},t) \tag{9.4}$$

这里 $f(\boldsymbol{r},t)$是 $\boldsymbol{r}$ 和$t$ 的任意函数(参看问题 9.2),这组方程描述涉及到势 $\phi$ 和 $\mathbf{A}$ 的物理体系,但是我们很快会看到:在量子力学里,就像在经典物理中一样,理论的预言并不依赖于规范的选择. (即,描述电磁场的特定的 $\varphi$ 和$A$),这一重要性质称为规范不变性(参看问题 9.5).

我们来考虑两个规范的例子,它们描述 $z$ 方向的恒定磁场,$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_0\hat{z}$. 首先,我们有对称规范

$$\boldsymbol{A} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B} = -\frac{1}{2}\begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ x & y & z \\ 0 & 0 & B_0 \end{vmatrix} \tag{9.5}$$

或 $\boldsymbol{A}=\frac{B_0}{2}(-y,x,0)$. 另一个规范是朗道规范

$$\boldsymbol{A} = (-B_0 y, 0, 0) \tag{9.6}$$

## 9.2 电磁场中粒子的哈密顿量

考虑质量为 $m$ 电荷为$q$ 的粒子,在有电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁场$\boldsymbol{B}$ 存在的情况下,粒子运动的经典方程是

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} = q\boldsymbol{E} + \frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} \tag{9.7}$$

导致这一运动方程的哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) + q\varphi \tag{9.8}$$

这里 $\boldsymbol{\varphi}$ 和 $\mathbf{A}$ 是根据(9.1)和(9.2)规定的和 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 相关的势.

在这一章,我们使用半经典的理论处理粒子在电磁场中的运动,在这种理论中,场和经典场类同,而体系按照量子力学的假设来处理. 这样,粒子用波函数描述,哈密顿量写成(9.8)的形式,但现在 $\boldsymbol{P}$,$\boldsymbol{A}$ 和 $\varphi$ 代表相应的算符(参看问题 9.3).

当我们按照(9.3)和(9.4)做规范变换时,描述粒子的波函数相应的变换(参看问题 9.4)为

$$\tilde{\psi}'(\boldsymbol{r},\ t) = \exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{c\hbar}f(\boldsymbol{r},\ t)\right]\psi(\boldsymbol{r},\ t) \tag{9.9}$$

## 9.3　概率密度和概率流

给定波函数 $\psi(\boldsymbol{r},\ t)$,概率密度是

$$\rho = |\ \psi(\boldsymbol{r}_0,\ t)\ |^2 \tag{9.10}$$

这里 $\rho$ 表示在时间 $t$ 在点 $\boldsymbol{r}_0$ 找到粒子的概率,对于质量为 $m$ 电荷为 $q$(没有磁矩)的粒子,概率流密度是

$$\boldsymbol{s} = \frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\psi^*\ \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{2q}{c}\mathbf{A}\psi^*\psi\right] \tag{9.11}$$

如果,我们还考虑粒子具有自旋 $s$ 和磁矩,我们有

$$\boldsymbol{s} = \frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\psi^*\ \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{2q}{c}\mathbf{A}\psi^*\psi\right] + \frac{\mu_s c}{S}\nabla\times(\psi^*\boldsymbol{S}\psi) \tag{9.12}$$

连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{s} = 0 \tag{9.13}$$

给出了概率密度和概率流的关系(参看问题 9.3). 概率密度 $\rho$ 和概率流 $\boldsymbol{S}$ 的确也不依赖于规范的选择,它们也被称为是规范不变的,参看问题 9.5. 相应于电荷为 $q$ 的粒子的"实际"流定义为

$$\boldsymbol{I} = q\boldsymbol{S} \tag{9.14}$$

## 9.4　磁矩

磁矩为 $\mu_s$ 的粒子,处于磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,相互作用哈密顿量为

$$H_{\text{int}} = -\mu_s\cdot\boldsymbol{B} \tag{9.15}$$

这一项应当加到哈密顿量(9.8)上,自旋为 $s$ 的电子具有磁矩

$$\mu = -\frac{eg}{2mc}\boldsymbol{S} \tag{9.16}$$

这里 $g$,旋磁关系常数非常接近于 2

$$g = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \cdots\right) = 2.002319 \tag{9.17}$$

## 9.5　单位制

在讨论电磁现象时,习惯上采用几种可能单位制的一种. MKS 制广泛应用于实际或工程

问题. 在研究电磁辐射和物质的基本组元的相互作用时,采用高斯单位制更方便一些. 因此,如同在本书其他章节一样,我们更愿意使用后者.

## 例 题 解 答

**9.1** 质量为 $m$ 电荷为 $q$ 的粒子在有电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁场 $\boldsymbol{B}$ 存在时,其经典运动方程是

$$m\boldsymbol{a} = q\boldsymbol{E} + \frac{q}{c}\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{9.1.1}$$

这里 $\boldsymbol{a}$ 是粒子的加速度,$\boldsymbol{v}$ 是它的速度$\left(\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\equiv\dot{\boldsymbol{r}}\text{ 和 }\boldsymbol{a}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\equiv\ddot{\boldsymbol{r}}\right)$. $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 必须满足麦克斯韦方程,于是就有可能定义矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\ t)$和标势 $\varphi(\boldsymbol{r},\ t)$使得

$$\text{I}\quad \boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t},\ \text{II}\quad \boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A} \tag{9.1.2}$$

证明哈密顿量

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) + q\varphi \tag{9.1.3}$$

产生运动方程. 你可以使用哈密顿方程

$$\text{I}\quad \dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}},\quad \text{II}\quad \dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}} \tag{9.1.4}$$

按照下述步骤进行:(a) 将 $\dot{\boldsymbol{r}}$ 写成 $\dot{\boldsymbol{p}}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的函数;(b) 将 $\ddot{\boldsymbol{r}}$ 写成 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的函数;(c)应用(9.1.4 II)将 $\boldsymbol{p}$ 写成 $\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的函数; (d)使用矢量的"链式法则"

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{A} = \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} \tag{9.1.5}$$

和矢量恒等式

$$(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} = -\boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{A}) + \nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{9.1.6}$$

求出$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}$. (e) 联立(a)到(d)求出运动方程.

**解** (a) 使用(9.1.4)和(9.1.3)我们得到

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) + q\varphi\right] = \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) = \boldsymbol{v} \tag{9.1.7}$$

(b)如同(a)我们得到

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = \frac{\mathrm{d}\dot{\boldsymbol{r}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right] = \frac{1}{m}\left[\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} - \frac{q}{c}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}\right] = \frac{1}{m}\left[\dot{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\dot{\boldsymbol{A}}\right] \tag{9.1.8}$$

(c) 从(9.1.4 II)和(9.1.3)我们得到

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}} = -\nabla H = -\nabla\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) + q\varphi\right] \tag{9.1.9}$$

考虑到在哈密顿方法中,$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 是相空间的独立变量,于是$\nabla\cdot\boldsymbol{p}=0$. 利用$\nabla(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p})=0$,我们将(9.1.9)写成

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{m}\nabla\left[\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right] - q\nabla\varphi \tag{9.1.10}$$

从(9.1.7)和(9.1.10)我们有

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{q}{c}\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) - q\nabla\varphi \tag{9.1.11}$$

(d) 从(9.1.5)和(9.1.6)我们得到

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}-\boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{A})+\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{9.1.12}$$

最后,利用(9.1.2Ⅱ)我们有

$$\dot{\boldsymbol{A}}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}-\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}+\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{9.1.13}$$

(e) 联立(9.1.8)、(9.1.11)和(9.1.13)我们得到

$$\ddot{\boldsymbol{r}}=\frac{1}{m}\left[\frac{q}{c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})-q\left(\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}+\nabla\varphi\right)\right] \tag{9.1.14}$$

将(9.1.14)乘以 $m$ 并利用(9.1.2Ⅰ),最后我们得到

$$m\ddot{\boldsymbol{r}}=\frac{q}{c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})+q\boldsymbol{E} \tag{9.1.15}$$

这就是运动方程.

**9.2** 令 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$和 $\varphi(\boldsymbol{r},t)$满足方程(9.1.2),对于给定的电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁场$\boldsymbol{B}$,势 $A$ 和$\phi$ 是惟一确定的吗? 如不是,请解释这种自由度.

**解** 假设对于相同的 $\boldsymbol{E}$ 和$\boldsymbol{B}$,$\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2$,$\varphi_1$ 和 $\varphi_2$ 都满足方程(9.1.2)即

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi_1-\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}_1}{\partial t}=-\nabla\phi_2-\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}_2}{\partial t} \tag{9.2.1}$$

和

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}_1=\nabla\times\boldsymbol{A}_2 \tag{9.2.2}$$

现在,如果 $\boldsymbol{A}$ 和$\varphi$ 被惟一确定,那么,我们一定有 $\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{A}_2$ 和 $\varphi_1=\varphi_2$,我们定义 $\boldsymbol{a}=\boldsymbol{A}_1-\boldsymbol{A}_2$ 和 $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$,并探究是否 $\boldsymbol{a}=0,\varphi=0$. 从(9.2.2)我们得到

$$\nabla\times\boldsymbol{a}=0 \tag{9.2.3}$$

因为任何函数的梯度都满足$\nabla\times(\nabla\times f)=0$,可以证明对某些函数 $f(\boldsymbol{r},t)$, $\boldsymbol{a}=\nabla f$. 如果我们使用(9.2.1),得到

$$\nabla\phi+\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial t}=0 \tag{9.2.4}$$

从(9.2.4)我们得到$\nabla\varphi+\frac{1}{c}\nabla\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)=0$或

$$\varphi=-\frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}+C(t) \tag{9.2.5}$$

这里 $C(t)$是 $t$ 的函数. 不失一般性,我们可以选取 $C=0$,因为这对应着能量相差一个常数. 因而,从(9.2.5)我们得到

$$\boldsymbol{a}=\nabla f,\quad \varphi=-\frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t} \tag{9.2.6}$$

这里$f(\boldsymbol{r},t)$是 $\boldsymbol{r}$ 和$t$ 的任意函数,我们看到 $\boldsymbol{a}$ 和$\phi$ 不必为零. 因为 $f$ 是任意的,$\boldsymbol{A}$ 和$\varphi$ 不能惟一确定. (9.2.6)给出的这种不惟一性被称为"规范自由度". 这意味着如果 $\boldsymbol{A}$ 和$\phi$ 满足(9.1.2),那么由变换方程

$$\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla f,\quad \varphi'=\varphi-\frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t} \tag{9.2.7}$$

得到 $\boldsymbol{A}'$和$\varphi'$也是电磁场的势.

**9.3** (a) 在存在电磁场的情况下,对质量为 $m$ 电量为$q$ 的粒子,写出其量子哈密顿量;(b) 在点 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0$ 时刻 $t=t_0$ 找到粒子的概率密度是什么? (c)求概率守恒方程以及概率流密度.

**解** (a) 用算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$和 $\hat{\boldsymbol{p}}$代替 $\boldsymbol{r}$ 和$\boldsymbol{p}$,就可由经典哈密顿量(9.1.3)得到量子哈密顿量. 但是,要

记住 $\boldsymbol{A}(r, t)$和 $\varphi(r, t)$是 $r$ 的函数,在这些函数中也必须用 $\hat{r}$代替 $\boldsymbol{r}$. 我们得到

$$H = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}, t)\right)^2 + q\varphi(\hat{\boldsymbol{r}}, t) \tag{9.3.1}$$

(b) 令 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$是粒子的波函数,那么在点 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0$ 时刻 $t = t_0$ 找到粒子的概率密度是

$$\rho(\boldsymbol{r}_0, t_0) = |\psi(\boldsymbol{r}_0, t_0)|^2 = \psi^*(\boldsymbol{r}_0, t_0)\psi(\boldsymbol{r}_0, t_0) \tag{9.3.2}$$

(c) 首先,我们来计算$\frac{\partial \rho}{\partial t}$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{9.3.3}$$

应用薛定谔方程和它的复共轭 $-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = (H\psi)^*$,我们得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[(H\psi^*)\psi - \psi^*(H\psi)] \tag{9.3.4}$$

我们使用坐标表象

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}, \quad \hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{9.3.5}$$

在坐标表象中,$\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}, t)$变成矢量函数,于是

$$\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}, t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \tag{9.3.6}$$

量子哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathrm{i}\hbar\nabla + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\mathrm{i}\hbar\nabla + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) + q\varphi \tag{9.3.7}$$

这样方程(9.3.4)给出

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left\{\psi\frac{1}{2m}\left[\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi^*\right]\right.$$
$$\left. - \psi^*\frac{1}{2m}\left[\left(\mathrm{i}\hbar\nabla + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\mathrm{i}\hbar\nabla + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi\right]\right\} \tag{9.3.8}$$

上式可以写成

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla\left\{\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi) - \frac{2q}{c}\boldsymbol{A}\psi^*\psi\right]\right\} \tag{9.3.9}$$

表述概率守恒的方程是

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{s} = 0 \tag{9.3.10}$$

这里 $\boldsymbol{s}$ 是概率流密度. 从方程(9.3.9)和(9.3.10)我们可以得出结论

$$\boldsymbol{s} = \frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{2q}{c}\boldsymbol{A}\psi^*\psi\right] \tag{9.3.11}$$

上式就是电磁场中运动粒子的概率流密度,在没有电磁场的真空中 $\boldsymbol{A} = 0$,(9.3.11)就简化为第三章中描述的概率流密度.

**9.4** 根据量子力学的假设,一个给定的物理体系用态矢量$|\psi\rangle$刻画,考虑质量为 $m$ 电量为$q$ 的粒子受电场$\boldsymbol{E}$ 和磁场$\boldsymbol{B}$ 的影响,在问题 9.2 中,我们曾证明,不同的势 $\boldsymbol{A}$ 和$\varphi$ 如何描述同样的$\boldsymbol{E}$ 和$\boldsymbol{B}$. 在本问题中,我们研究态矢量$|\psi\rangle$如何依赖于规范($\boldsymbol{A}$ 和 $\varphi$)的选择. 请遵照如下的步骤:(a) 先写出以 $\boldsymbol{A}$ 和$\varphi$ 表示的哈密顿量,再写出以 $\boldsymbol{A}'$和$\varphi'$表示的哈密顿量,$\boldsymbol{A}'$和$\varphi'$与$\boldsymbol{A}$ 和$\varphi$ 的关系满足式(9.2.7);(b) 写出两种情况的薛定谔方程;(c) 证明如果 $\psi$ 是第一个薛定谔方程的解,那么

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r}, t)/c\hbar}\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{9.4.1}$$

是第二个方程的解[这里 $f$ 与式9.2.7 中的相同];(d)讨论结果

**解** 根据(9.1.3),对 $\boldsymbol{A}$ 和$\varphi$,哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)+q\varphi \tag{9.4.2}$$

同样,对 $\boldsymbol{A}'$ 和 $\varphi'$,我们有

$$\widetilde{H}=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\right)\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\right)+q\varphi' \tag{9.4.3}$$

应用(9.2.7)我们得到

$$\widetilde{H}=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}-\frac{q}{c}\nabla f\right)\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}-\frac{q}{c}\nabla f\right)+q\varphi-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t} \tag{9.4.4}$$

(b) 在第一种情况,薛定谔方程是

$$H|\psi\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} \tag{9.4.5}$$

我们用(9.4.2)写出薛定谔方程,在坐标表象中,用 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 代替 $\boldsymbol{p}$,我们得到

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\varphi\right]\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \tag{9.4.6}$$

对第二种情况,我们有

$$\widetilde{H}|\tilde{\psi}\rangle=\mathrm{i}\hbar\frac{d|\tilde{\psi}\rangle}{dt} \tag{9.4.7}$$

应用(9.4.4),在坐标表象中,我们有

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}-\frac{q}{c}\nabla f\right)^2+q\varphi-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\right]\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \tag{9.4.8}$$

(c) 设 $\psi(\boldsymbol{r},t)$是(9.4.6)的解. 定义

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{9.4.9}$$

我们希望证明,$\tilde{\psi}$ 是方程(9.4.8)的解. 使用(9.4.6)和(9.4.9)我们有

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}&=-\frac{q}{c}\frac{\partial f(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\psi(\boldsymbol{r},t)+\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right)\\&=-\frac{q}{c}\frac{\partial f(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)+\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\varphi\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)\end{aligned} \tag{9.4.10}$$

于是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{q}{c}\frac{\partial f(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+q\varphi\right]\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)+\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t) \tag{9.4.11}$$

我们计算方程(9.4.11)右边最后一项

$$\begin{aligned}&\left[\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)\\&=\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\left(-\frac{q}{c}\nabla f(\boldsymbol{r},t)-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}\left(-\frac{q}{c}\nabla f-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(-\frac{q}{c}\nabla f-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)\end{aligned} \tag{9.4.12}$$

所以

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{q}{c}\frac{\partial f(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+q\varphi+\frac{1}{2m}\left(-\frac{q}{c}\nabla f-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right]\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t) \tag{9.4.13}$$

于是,$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r},t)$的确是薛定谔方程(9.4.8)的解.

(d) 我们看到,从一个规范过渡到另一个规范,描述体系的态矢量也要作出变换 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},t)/c\hbar}$,这里 $f(\boldsymbol{r},t)$是联系两个规范的函数. 对于波函数,规范变换相应于相位变化,该相位变化随空间点不同而不同,因此它不是整体的相位因子. 但是,用波函数 $\psi$ 和 $\tilde{\psi}$ 所得到的物理预言是相同的. 因为当我们作规范

变换时，描述物理量的算符也跟着变换(参看问题 9.5).

**9.5** 在问题 9.4 中，我们曾证明，当我们做规范变换

$$\begin{cases} \boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla f \\ \varphi \to \varphi' = \varphi - \dfrac{1}{c}\dfrac{\partial f}{\partial t} \end{cases} \tag{9.5.1}$$

时，描述质量为 $m$ 电量为 $q$ 的粒子的波函数按照

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t) \to \psi'(\boldsymbol{r},\ t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi(\boldsymbol{r},\ t) \tag{9.5.2}$$

变换. (a)当从一个规范过渡到另一个规范时，求概率密度和概率流的变化. (b)设在时刻 $t$，我们想测量物理量 $Q$，测得 $Q$ 的本征值 $q$ 的概率依赖于规范吗？(为简单起见，设 $q$ 是非简并的.)

**解答**　(a) 在第一个规范下，概率密度是

$$s = \frac{1}{2m}\left\{\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{2q}{c}\boldsymbol{A}\psi^* \psi\right\} \tag{9.5.3}$$

当我们做规范变换(9.5.1)时，我们有

$$\begin{aligned} s' &= \frac{1}{2m}\left\{\frac{\hbar}{\mathrm{i}}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi^* \nabla(\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi) - \mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi\nabla(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi^*)]\right. \\ &\quad \left. - \frac{2q}{c}(\boldsymbol{A} + \nabla f)(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi^*)(\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi)\right\} \\ &= \frac{1}{2m}\left\{\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}\psi^* \nabla f\psi + \psi^* \nabla \psi + \frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}\psi \nabla f\psi^* - \psi \nabla \psi^*\right] - \frac{2q}{c}(A + \nabla f)\psi^* \psi\right\} \\ &= \frac{1}{2m}\left\{\frac{\hbar}{\mathrm{i}}[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] - \frac{2q}{c}\boldsymbol{A}\psi^* \psi\right\} \end{aligned}$$

我们看到概率流是规范不变的.

(b) 设 $\phi(\boldsymbol{r},\ t)$是 $Q$ 的相应于本征值 $q$ 的本征函数

$$Q\phi(\boldsymbol{r},\ t) = q\phi(\boldsymbol{r},\ t) \tag{9.5.4}$$

根据量子力学假设(参看第四章)，当体系处于态 $\psi(\boldsymbol{r},\ t)$，测得 $q$ 的概率是

$$P_q = \langle \phi \mid \psi \rangle = \phi^*(\boldsymbol{r},\ t)\psi(\boldsymbol{r},\ t) \tag{9.5.5}$$

当我们做规范变换(9.5.1)，波函数 $\phi(\boldsymbol{r},\ t)$将变换为

$$\phi(\boldsymbol{r},\ t) \to \phi'(\boldsymbol{r},\ t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\phi(\boldsymbol{r},\ t) \tag{9.5.6}$$

测得 $q$ 的概率将按照(9.5.2)和(9.5.6)确定

$$P'_q = \phi'^*(\boldsymbol{r},\ t)\psi'(\boldsymbol{r},\ t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\phi^*(\boldsymbol{r},\ t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}qf(\boldsymbol{r},\ t)/c\hbar}\psi(\boldsymbol{r},\ t) = \phi^*(\boldsymbol{r},\ t)\psi(\boldsymbol{r},\ t) = P_q \tag{9.5.7}$$

我们将如下的陈述作为结论：所有物理预言不依赖规范的选择.

**9.6** 一维谐振子由质量为 $m$ 的粒子和势能

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{9.6.1}$$

组成. 此外，该粒子还具有电荷 $q$ 并置于平行于 $x$ 轴的均强电场 $\boldsymbol{E}$ 中，$\boldsymbol{E} = E\,\hat{x}$. (a) 求对应于电场的势 $\phi(x)$；(b)写出粒子的哈密顿量；(c) 做坐标变换 $y = ax + b$($a$ 和 $b$ 是常数)，这样，在 $y$ 一方向，哈密顿量和一维谐振子(不带电荷)相同，$a$ 和 $b$ 是多大？(d) 求系统的能量本征值和本征态.

**解答**　(a) 我们有 $\boldsymbol{E} = E\,\hat{x}$，并求 $\phi(x,t)$，于是

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi \tag{9.6.2}$$

因为 $\boldsymbol{B}=0$,我们寻找 $\boldsymbol{A}=0$ 的规范,积分(9.6.2)我们得到 $\phi(x)=-\varepsilon x+c$,这里 $c$ 是积分常数,我们选取 $c=0$,于是

$$\phi(x)=-\mathbf{E}x \tag{9.6.3}$$

(b) 总哈密顿量是

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-\varepsilon x \quad (\varepsilon=qE) \tag{9.6.4}$$

(9.6.4)右边第一项是标准的动能项,第二项是谐振子势能,第三项是电势能.

(c) 我们将(9.6.4)写成如下形式:

$$H_y=\frac{p_y^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_y^2y^2+H_0 \tag{9.6.5}$$

这里 $H_0$ 是常数,而 $y=ax+b$.考虑动能项,我们看到 $p_x=p_y$ 于是 $a=1$. 现在我们将 $y=ax+b$ 代入(9.6.5)并得到

$$H_y=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(x+b)^2+H_0=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+m\omega^2bx+\frac{1}{2}m\omega^2b^2+H_0 \tag{9.6.6}$$

从(9.6.4)和(9.6.6)我们看到仅当 $b=-\varepsilon/m\omega^2$ 和 $H_0=-\varepsilon^2/2m\omega^2$ 时

$$H_x=H_y \tag{9.6.7}$$

结论,如果我们做坐标变换 $y=x-\varepsilon/m\omega^2$,我们得到不带电荷的一维谐振子,能量漂移为 $-\varepsilon^2/2m\omega^2$.

(d) 一维谐振子的能量本征值是

$$E_n=\frac{1}{2}\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{2}\frac{\varepsilon^2}{m\omega^2} \tag{9.6.8}$$

其本征函数是

$$\psi_n(y)=\psi_n\left(x-\frac{\varepsilon}{m\omega^2}\right) \tag{9.6.9}$$

作为 $y$ 的函数(9.6.9)表示了标准一维谐振子本征函数. 注意作为 $x$ 的函数,这些本征函数是不同的.

**9.7** 考虑常磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\hat{z}$. (a)求相应于对称规范 $\mathbf{A}=-\frac{1}{2}\mathbf{r}\times\boldsymbol{B}$ 的势 $\mathbf{A}$;(b) 求相应于非对称规范的势 $\mathbf{A}$;(c) 计算联系(a)和(b)两种规范的规范函数 $f(\boldsymbol{r},t)$.

**解** 在对称规范中 $\mathbf{A}=-\frac{1}{2}\begin{vmatrix}\hat{x} & \hat{y} & \hat{z}\\ x & y & z\\ 0 & 0 & B_0\end{vmatrix}=-\frac{1}{2}yB_0\hat{x}+\frac{1}{2}xB_0\hat{y}$ (9.7.1)

子是

$$\boldsymbol{A}=\frac{B_0}{2}(-y,x,0) \tag{9.7.2}$$

(b) 我们可以使用任何其他的规范,并求出不同的 $\mathbf{A}$. 例如,我们试图求的 $\boldsymbol{A}$ 仅有 $x$ 方向的分量 $\boldsymbol{A}=A_x\hat{x}$,在这种情况

$$\nabla\times\boldsymbol{A}=\begin{vmatrix}\hat{x} & \hat{y} & \hat{z}\\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z}\\ \widetilde{A}_x & 0 & 0\end{vmatrix}=+\left(\frac{\partial\widetilde{A}_x}{\partial z}\right)\hat{y}-\left(\frac{\partial\widetilde{A}_x}{\partial y}\right)\hat{z}=B_0\hat{z} \tag{9.7.3}$$

积分(9.7.3)我们得到 $\widetilde{A}x=-B_0y+c$. 我们可以取 $c=0$,于是

$$\widetilde{A}_x=-B_0y,\quad \widetilde{A}_y=\widetilde{A}_z=0 \tag{9.7.4}$$

(c) 我们想找规范函数,使得 $\mathbf{A}=\widetilde{\mathbf{A}}+\nabla f$(参考问题9.2)从(9.7.2)和(9.7.4)我们发现

$$\begin{cases}\mathbf{A}=\dfrac{B_0}{2}(-y,x,0)\\ \widetilde{\mathbf{A}}=B_0(-y,0,0)\end{cases} \tag{9.7.5}$$

或,写得更明确些

$$\begin{cases} A_x = -\frac{B_0}{2}y = \tilde{A}_x + \partial_x f = -B_0 y + \partial_x f \\ A_y = \frac{B_0}{2}x = \tilde{A}y + \partial_y f = \partial_y f \end{cases} \tag{9.7.6}$$

所以

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{B_0}{2}y, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{B_0}{2}x \tag{9.7.7}$$

积分(9.7.7),最后,我们得到

$$f(x, y) = \frac{B_0}{2}xy + \text{const.} \tag{9.7.8}$$

**9.8** 质量为 $m$ 电荷为 $q$ 的粒子处于常磁场 $\boldsymbol{B}$ 的区域,设 $\boldsymbol{B}$ 沿 $\hat{z}$ 方向,使用朗道规范,即 $\boldsymbol{A}=(-By, 0, 0)$,(a) 粒子的哈密顿量是什么? (b) 证明哈密顿量与 $p_x$、$p_z$ 对易;(c) 以 $\hat{p}_z$ 和 $\hat{p}_z$ 的本征向量为基,使用分离变数法证明:对 $y$ 分量薛定谔方程简化为谐振子的薛定谔方程(参看问题 9.6);(d)求哈密顿量的本征态和本征能量.

**解** (a)经典哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{q} + \frac{q}{c}By\hat{e}_x\right)\cdot\left(\boldsymbol{p} + \frac{q}{c}By\hat{e}_x\right) \tag{9.8.1}$$

这里 $\hat{e}_x$ 是$x$ 方向的单位矢量. 因此哈密顿算符是

$$H = \frac{1}{2m}(p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2m}\left(p_x + \frac{q}{c}By\right)^2 = \frac{1}{2m}\left[p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + \frac{2q}{c}Byp_x + \left(\frac{q}{c}B\right)^2 y^2\right] \tag{9.8.2}$$

(b) 要求出哈密顿算符和 $p_x$ 或$p_z$ 的对易关系,我们使用已知的关系

$$[p_x, p_y] = [p_x, p_z] = [p_x, y] = [p_x, z] = [p_z, y] = 0 \tag{9.8.3}$$

并得到

$$[H, p_x] = \frac{1}{2m}\left([p_x^2, p_x] + \frac{2qB}{c}y[p_x, p_x]\right) \tag{9.8.4}$$

根据定义$[p_x, p_x]=[p_z, p_z]=0$,于是容易求出$[H, p_x]=0$,对 $p_z$ 也有同样的结果

$$[H, p_z] = \frac{1}{2m}[p_z^2, p_z] = 0 \tag{9.8.5}$$

(c) 因 $H$ 与$p_x$ 和$p_z$ 对易,我们可以求出 $H$ 的本征态,它也是 $p_x$ 和$p_z$ 的本征态(还考虑到$[p_x, p_z]=0$). 我们用分离变数法,即 $\psi(x, y, z)=\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$. 对 $\psi_x$ 和$\psi_z(z)$我们分别选为 $p_x$ 和$p_y$ 的本征态.

$$\begin{cases} \psi_x(x) \equiv \psi_{p_x}(x) = e^{ip_x x/\hbar} \\ \psi_z(z) \equiv \psi_{p_z}(z) = e^{ip_z z/\hbar} \end{cases} \tag{9.8.6}$$

于是

$$\psi(x, y, z) = e^{ip_x x/\hbar}e^{p_z z/\hbar}\psi_y(y) \tag{9.8.7}$$

这里的 $p_x$ 和$p_y$ 现在是常数(它们就是本征值). 应用(9.8.2)和(9.8.7),我们得到薛定谔方程

$$H\psi = \frac{1}{2m}\left[p_x^2 + p_z^2 + p_y^2 + \frac{2qBp_x}{c}y + \left(\frac{q}{c}B\right)^2 y^2\right]\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \tag{9.8.8}$$

注意,在(9.8.8)中,$p_x$ 和$p_z$ 是常数,只有 $p_y$ 和$y$ 是算符,我们记$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_z^2) = a$, 那么(9.8.8)可以写为

$$\left[\frac{1}{2m}p_y^2+\left(\frac{qBp_x}{mc}\right)y+\frac{1}{2m}\left(\frac{qB}{c}\right)^2y^2\right]\psi(x,y,z)=(E-a)\psi(x,y,z) \tag{9.8.9}$$

现在,我们看到,薛定谔方程的 $y$ 分量和问题(9.6)中的哈密顿算符相同.[例如,参看(9.6.4)]. 为证明 $y$ 一分量和谐振子的哈密顿算符相同,我们做一个如同 9.6 中的变换;即

$$\begin{cases} y\to\tilde{y}=y+\dfrac{cp_x}{qB} \\ p_y\to p_{\tilde{y}}=p_y \end{cases} \tag{9.8.10}$$

于是薛定谔方程(9.8.9)变为

$$\left[\frac{1}{2m}p_{\tilde{y}}^2+\frac{1}{2m}\left(\frac{qB}{c}\right)^2\tilde{y}^2-\frac{p_x^2}{2m}\right]\psi=(E-a)\psi \tag{9.8.11}$$

或

$$\left[\frac{1}{2m}p_{\tilde{y}}^2+\frac{1}{2m}\left(\frac{qB}{c}\right)^2\tilde{y}^2\right]\psi=\left(E-\frac{p_z^2}{2m}\right)\psi \tag{9.8.12}$$

如果我们记 $\tilde{E}=E-p_z^2/2m$, (9.8.12)变为

$$\left[\frac{1}{2m}p_{\tilde{y}}^2+\frac{1}{2}m\omega_B^2\tilde{y}^2\right]\psi(x,\tilde{y},z)=\tilde{E}\psi(x,\tilde{y},z) \tag{9.8.13}$$

这里 $\omega_B^2=\left(\frac{qB}{cm}\right)^2$. 我们看到(9.8.13)的确是一维谐振子薛定谔方程.

(d) 因为(9.8.13)是谐振子的薛定谔方程,我们知道它的本征值和本征态:

$$\tilde{E}_n=\hbar\omega_B\left(n+\frac{1}{2}\right)=\hbar\frac{qB}{mc}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{9.8.14}$$

和

$$\psi_{\tilde{y}}(\tilde{y})=\left(\frac{m\omega_B}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-m\omega_B\tilde{y}^2/2\hbar}H_n(\tilde{y}) \tag{9.8.15}$$

最初哈密顿算符(9.8.2)的本征值是 $E$[参看(9.8.8)],所以

$$E_n=\tilde{E}_n+\frac{p_z^2}{2m}=\hbar\frac{qB}{mc}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{p_z^2}{2m} \tag{9.8.16}$$

这里本征函数 $\psi_n(x,y,z)$是

$$\psi_n(x,y,z)=\left(\frac{m\omega_B}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{ip_xx/\hbar}e^{ip_zz/\hbar}\exp\left[-\frac{m\omega_B}{2\hbar}\left(y+\frac{cp_x}{qB}\right)^2\right]H_n\left(y+\frac{cp_x}{qB}\right) \tag{9.8.17}$$

**9.9** 对自旋为 1/2 磁矩 $\mu=\mu_s\boldsymbol{S}$ 的粒子,求解问题 9.8.

**解** (a) 我们在哈密顿算符上加上自旋和磁场的相互作用能

$$H=-\mu\cdot\boldsymbol{B} \tag{9.9.1}$$

得到总哈密顿算符

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\mu\cdot\boldsymbol{B} \tag{9.9.2}$$

磁场是 $\boldsymbol{B}=B\hat{z}$,我们用规范 $\boldsymbol{A}=(-B,0,0)$得到哈密顿算符:

$$H=\frac{1}{2m}\left[p_x^2+p_z^2+p_y^2+\frac{2qBp_x}{c}y+\left(\frac{qB}{c}\right)^2y^2\right]-\frac{\mu_sB}{S}S_z \tag{9.9.3}$$

(b) 容易看出,除一项$\frac{\mu_sB}{S}S_z$需审查外,哈密顿算符(9.9.3)和 $p_x$ 与 $p_z$ 对易. 因自旋自由度和空间变数无关,我们有$[\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{S}]=0$. 特别地有

$$\left[p_x,\frac{\mu_sB}{S}S_z\right]=\left[p_z,\frac{\mu_sB}{S}S_z\right]=0 \tag{9.9.4}$$

(c) 包括自旋态,我们使用 $p_x$ 和 $p_z$ 以及 $S^2$ 和 $S_z$ 的本征态为基,即我们的波函数是

$$\psi(x, y, z)\chi_{\text{spin}} = e^{ip_x x/\hbar} e^{ip_z z/\hbar}\psi_y(y)\chi(S = 1/2, S_z) \tag{9.9.5}$$

这里 $\chi(S=1/2,S_z)$是电子的自旋态,是 $S^2$ 和 $S_z$ 的本征函数.

$$S^2\chi(S = 1/2, S_z) = \hbar^2 S(S+1)\chi(S = 1/2, S_z) = \frac{4}{3}\hbar^2\chi(S = 1/2, S_z) \tag{9.9.6}$$

$$S_z\chi(S = 1/2, S_z) = \hbar S_z\chi(S = 1/2, S_z) = \left(\pm\frac{1}{2}\right)\hbar\chi(S = 1/2, S_z) \tag{9.9.7}$$

我们用泡利矩阵 $S=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 表示算符$S$,态 $\chi\left(\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right)$可以写为

$$\chi\left(\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad \chi\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{9.9.8}$$

参看第七章.

(d) 为求出本征函数和本征值,我们仿照(9.8)的(d),并写出薛定谔方程

$$\left(\frac{1}{2m}p_{\tilde{y}}^2 + \frac{1}{2}m\omega_B^2\tilde{y}^2 + \frac{1}{2m}p_z^2 - \frac{\mu_s}{S}BS_z\right)\psi(x, y, z)\chi_{\text{spin}} = E\psi(x, y, z)\chi_{\text{spin}} \tag{9.9.9}$$

这里[仿照问题 9.8 的(d)参看(9.8.10)和(9.8.13)]

$$\begin{cases}\tilde{y} = y + \dfrac{cp_x}{qB}\\[2ex] \omega_B = \dfrac{qB}{cm}\end{cases} \tag{9.9.10}$$

并且,$p_z$. $S=1/2$ 和 $S_z=\pm 1/2$ 都是常数. 定义

$$\bar{E} = E - \frac{qB}{cm} + \frac{\mu_s}{S}BS_z \tag{9.9.11}$$

我们就方程(9.9.9)得到标准的一维谐振子薛定谔方程

$$\left(\frac{1}{2m}p_{\tilde{y}}^2 + \frac{1}{2}m\omega_B^2\tilde{y}^2\right)\psi = \bar{E}\psi \tag{9.9.12}$$

具有本征值 $\bar{E}=\hbar\omega_B(n+1/2)$和本征态函数 $\psi(x, y, z)\chi_{\text{spin}}$,这里 $\psi(x, y, z)$由(9.8.17)给出. 所以薛定谔方程(9.9.9)的本征值是

$$E = \hbar\frac{qB}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu_s}{S}BS_z \tag{9.9.13}$$

这些本征值是著名的朗道能级(Landau levels).

**9.10** 考虑问题 9.8 中的粒子. (a) 设粒子处于一个很大但又有限的箱中,$0\leqslant x\leqslant L_x$, $-L_y\leqslant y\leqslant L_y$ 和 $0\leqslant z\leqslant L_z$. 写出该条件下的本征函数;(b) 求每单位面积上态数目(在 $xy$ 平面上)

**解答** 考虑薛定谔方程

$$H\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \tag{9.10.1}$$

这里 $H$ 由(9.8.2)给出,还要考虑边界条件

$$\begin{cases}\text{I} & \psi(x=0) = \psi(x=L_x) = 0\\ \text{II} & \psi(y=-L_y) = \psi(y=L_y) = 0\\ \text{III} & \psi(z=0) = \psi(z=L_z) = 0\end{cases} \tag{9.10.2}$$

使用问题 9.8 中的分离变数法和(9.10.2 I )以及(9.10.2 III),我们以

$$\begin{cases}\psi_x(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2L_x}}\sin(p_x x)\\[2ex] \psi_z(z) = \dfrac{1}{\sqrt{2L_z}}\sin(p_z z)\end{cases} \tag{9.10.3}$$

代替(9.8.6). 这里

$$\begin{cases} p_x = \frac{\pi}{L_x}\hbar n_x, & n_x = 0, 1, 2, \cdots \\ p_z = \frac{\pi}{L_z}\hbar n_z, & n_z = 0, 1, 2, \cdots \end{cases} \tag{9.10.4}$$

设 $L_y$ 是非常之大,致使$\frac{qB}{2\hbar c}L_y^2 \gg 1$,波函数(9.8.15)的 $y$ 组元,就像在波函数 $\psi(\bar{y})$的情况一样,基本不受边界条件(9.10.2Ⅱ)的影响. 因此本征态是[参看(9.8.17)]

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{m\omega_B}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{2\sqrt{L_xL_z}}\sin(p_x x)\sin(p_z z)\exp\left[\frac{-m\omega_B}{2\hbar}\left(y + \frac{cp_x}{qB}\right)^2\right]H_n\left(y + \frac{cp_x}{qB}\right) \tag{9.10.5}$$

本征能量是[参看(9.8.16)]

$$E_{n_y n_z} = \hbar\frac{qB}{mc}\left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{L_z}\right)^2 n_z^2 \tag{9.10.6}$$

这里,我们使用了 $p_z = \pi\hbar n_z/L$[参看(9.10.4)],注意,(9.10.6)不依赖 $n_x$,这样,就出现简并.

(b) 在 $xy$ 平面上的态数目是使得粒子位于区域$0 \leqslant x \leqslant L_x$, $-L_y \leqslant y \leqslant L_y$ 以内的不同的 $n_x$ 和 $n_y$ 的数目. 我们注意到在 $y$ 方向,有位于 $y_0 = -cp_x/qB$ 的谐振子[参看(9.8.10)和(9.8.11)],设离开平衡点 $y = y_0$ 的偏移很小,我们只要求 $-L_y \leqslant y_0 \leqslant L_y$,于是

$$-L_y \leqslant -\frac{cp_x}{qB} \leqslant L_y \tag{9.10.7}$$

利用(9.10.4)我们得到

$$-L_y \leqslant -\frac{c}{qB}\left(\frac{\pi\hbar}{L_x}\right)n_x \leqslant L_y,$$

或者

$$-\left(\frac{qB}{\pi\hbar c}\right)L_xL_y \leqslant n_x \leqslant \left(\frac{qB}{\pi\hbar c}\right)L_xL_y \tag{9.10.8}$$

在区域 $0 \leqslant x \leqslant L_x$ 和 $-L_y \leqslant y \leqslant L_y$ 内不同态的数目是(9.10.8)中不同 $n_x$ 的数目,即

$$n_x = \frac{qB}{\hbar c}L_xL_y \tag{9.10.9}$$

对一个 $n_x$ 有两个自旋态,最后,我们求出态的总数目是

$$N = \frac{2qB}{\hbar c}L_xL_y \tag{9.10.10}$$

所以,每单位面积的态数目是

$$n = \frac{N}{S} = \frac{2\frac{qB}{\hbar c}L_xL_y}{2L_xL_y} = \frac{qB}{\hbar c} \tag{9.10.11}$$

**9.11** 参考问题9.10. 在 $p_x = 0$ 的条件下,证明电流 $\boldsymbol{I}$ 的确为零.

**证明**　利用概率流密度定义(参看问题9.3),我们得到电流密度

$$\boldsymbol{J} = q\boldsymbol{s} = \frac{q}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}(\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{2q}{c}\boldsymbol{A}\psi^*\psi\right] \tag{9.11.1}$$

因 $\psi$ 是实数,我们有 $\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^* = 0$. 于是

$$\boldsymbol{J} = -\frac{q^2}{2mc}\boldsymbol{A}\psi^*\psi \tag{9.11.2}$$

在问题9.5中,我们曾经证明,概率流是规范不变的. 于是我们就可以选择矢势 $\boldsymbol{A}$,例如 $\boldsymbol{A} = (-By, 0, 0)$(参看问题9.8)我们有

$$\begin{cases} J_y = J_z = 0 \\ J_x = \dfrac{q^2}{2mc}By\psi^* \psi \end{cases} \tag{9.11.3}$$

应用(9.10.5)和 $p_z=0$,我们容易看出 $\psi^*\psi$ 是 $y$ 的偶函数. 电流 $\boldsymbol{I}$

$$\boldsymbol{I} = \int \boldsymbol{J} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{9.11.4}$$

我们有 $I_y = I_z = 0$,于是

$$I_x = \frac{q^2 B}{2mc}\int_{-L_y}^{L_y} y \mid \psi(y) \mid^2 \mathrm{d}y \int_0^{L_x} \mid \psi_x(x) \mid^2 \mathrm{d}x \int_0^{L_z} \mid \psi_z(z) \mid^2 \mathrm{d}z \tag{9.11.5}$$

因为 $|\psi(y)|^2$ 是偶函数(仅当 $p_z=0$ 的情况). 最后,我们得到 $\int_{L_y}^{L_y} \mid \psi(y) \mid^2 y\mathrm{d}y = 0$ 和 $I_x = 0$,粒子的经典运动是环形的,这样在 $x$ 和 $y$ 方向的总电流为零.

**9.12** 对于问题9.10中的粒子和电场 $\boldsymbol{E}=E\hat{y}$: (a) 求粒子的本征态和本征值;(b) 如果 $p_x=0$ 证明 $I_x\neq 0$, 即使电场 $\boldsymbol{E}$ 只有 $y$ 分量. 另外漂移速度是什么?

**解答**　我们在(9.8.2)的哈密顿算符上加上势能项

$$H_e = q\varphi \tag{9.12.1}$$

这里 $\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi$. 因为 $\boldsymbol{E}=E\hat{y}$,我们有 $\varphi=-Ey$,总的哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\phi = \frac{1}{2m}\left[p_x^2 + p_z^2 + p_y^2 + \frac{2qBp_x}{c}y - 2mqEy + \left(\frac{qB}{c}\right)^2 y^2\right] \tag{9.12.2}$$

采用坐标表象,我们得到薛定谔方程是

$$\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{2qBp_x}{c}y - 2mqEy + \left(\frac{qB}{c}\right)^2 y^2\right]\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \tag{9.12.3}$$

这里,我们利用了 $H_e$ 和 $p_x$ 与 $p_z$ 对易, $\psi(y)$的方程是

$$\frac{1}{2m}\left[\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left(\frac{2qBp_x}{c} - 2mEq\right)y + \left(\frac{qB}{c}\right)^2 y^2\right]\psi(y) = \varepsilon\psi(y) \tag{9.12.4}$$

这里 $\varepsilon = E - \frac{p_x^2}{2m} - \frac{p_z^2}{2m}$, 定义

$$\tilde{y} = y + \frac{cp_x}{qB} - \frac{v_D}{\omega_B} \tag{9.12.5}$$

这里 $v_D = \frac{CE}{B}$ 和 $\omega_B = \frac{qB}{cm}$ 我们从(9.12.3)得到

$$\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \bar{y}^2} + \frac{1}{2}m\omega_B^2\bar{y}^2\right)\psi(\bar{y}) = \bar{E}\psi(\bar{y}) \tag{9.12.6}$$

这里

$$\bar{E} = E - \frac{p_z^2}{2m} + p_x v_D - \frac{1}{2}mv_D^2 \tag{9.12.7}$$

方程(9.12.6)的本征态是标准的一维谐振子,能谱是

$$E_{n_x n_y n_z} = \bar{E}_{n_y} + \frac{p_z^2}{2m} - p_x v_D + \frac{1}{2}mv_D^2 = \hbar\omega_B\left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{L_z^2}\right)n_z^2 - \frac{\pi\hbar v_D}{L_x}n_x + \frac{1}{2}mv_D^2 \tag{9.12.8}$$

注意,和(9.10.6)不同,(9.12.8)的能谱和 $n_x$ 有关,简并被消除(由于电场的存在).

(b) 电流表示式(9.11.4)是 $\boldsymbol{I} = \int J\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$,应用(9.11.3)我们有 $I_y = I_z = 0$ 和

$$I_z = \frac{q^2 B}{2mc}\int_{-L_y}^{L_y} |\psi(y)|^2 y\mathrm{d}y \tag{9.12.9}$$

但是,要注意,这里和问题9.11的情况相反,既使对 $p_x=0$,因为由(9.12.5)函数 $|\psi(y)|^2$ 也不是偶函数. 对 $p_x=0$ 我们结论

$$\bar{y} = y - \frac{v_D}{\omega_B} \tag{9.12.10}$$

$|\psi(\bar{y})|^2$ 是 $\bar{y}$ 的偶函数,但不是 $y$ 的偶函数. 如果我们在(9.12.9)中做坐标变换 $y \to \bar{y}$,我们得到

$$I_z = \frac{q^2 B}{2mc}\int_{-L_y+v_D/\omega_B}^{L_y-v_D/\omega_B} \left(\bar{y} + \frac{v_D}{\omega_B}\right)|\psi(\bar{y})|^2 \mathrm{d}\bar{y} \tag{9.12.11}$$

现在,利用 $L_y \gg \frac{v_D}{\omega_B}$,我们得到

$$I_z \approx \frac{q^2 B}{2mc}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\bar{y} + \frac{v_D}{\omega_B}\right)|\psi(\bar{y})|^2 \mathrm{d}\bar{y} \tag{9.12.12}$$

第一项(和 $\bar{y}$ 成线性关系)结果为零,因为被积分函数是反对称的,第二项给出

$$I_z = \frac{q^2 B v_D}{2mc\omega_B}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\bar{y})|^2 \mathrm{d}\bar{y} = \frac{q^2 B}{2mc}\frac{v_D}{\omega_B} = qv_D \tag{9.12.13}$$

和我们预期的一样,$v_D$ 是漂移速度($v_D = CE/B$).

**9.13** 考虑一个在标势 $V(r)$ 和磁场 $\boldsymbol{B} = B_0\hat{z}$ 中运动的质量为 $m$,电荷为 $q$ 的无自旋粒子. 在矢势的对称规范 $\boldsymbol{A} = \frac{-1}{2}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}$ 下构造粒子的哈密顿算符. 并将其写成无磁场情况下的哈密顿算符 $H_0$ 和附加项 $H_1$ 的和.

**解**　我们有

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) \tag{9.13.1}$$

利用方程(9.5),通过计算得出

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 &= p^2 + \frac{q}{2c}[\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}) + (\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{p}] + \frac{q^2}{4c^2}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B})^2 \\ &= p^2 + \frac{qB_0}{2c}(-p_x y + p_y x - yp_x + xp_y) + \frac{q^2B_0^2}{4c^2}(x^2+y^2) \\ &= p^2 + \frac{qB_0}{c}(xp_y - yp_x) + \frac{q^2B_0^2}{4c^2}(x^2+y^2) \\ &= p^2 + \frac{qB_0}{c}L_z + \frac{q^2B_0^2}{4c^2}(x^2+y^2)\end{aligned} \tag{9.13.2}$$

将(9.13.2)代入(9.13.1),我们得到

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{qB_0}{2mc}L_z + \frac{q^2B_0^2}{8mc^2}(x^2+y^2) + V(\boldsymbol{r}) \tag{9.13.3}$$

由此看出 $H = H_0 + H_1$,其中

$$H_0 = \frac{1}{2m}p^2 + V(\boldsymbol{r}) \tag{9.13.4}$$

$$H_1 = -\frac{\mu B_0 L_z}{\hbar} + \frac{q^2B_0^2}{8m}(x^2+y^2) \tag{9.13.5}$$

其中 $\mu$ 为玻尔磁子 $\mu = \frac{q\hbar}{2mc}$

**9.14** 一束自旋极化沿 $z$ 轴正向,并沿 $y$ 轴方向运动的极化电子进入有均匀磁场 $\boldsymbol{B} = B_0\hat{x}$ 的区域. 经过 $T$ 时段后接触到一个磁场沿 $z$ 轴方向的 Stern-Gerlech 实验装置. (a)写出

在均匀磁场区域里的相互作用哈密顿算符;(b)如果探测器D只能探测自旋极化沿 $z$ 轴负向的电子,试求使所有的电子都能被D探测到的 $B_0$ 值;(c)对于(b)中最小的 $B_0$ 值,在 $T/2$(不是 $T$)时段后被D探测到的电子的百分比是多大?

**解答** (a) 电子和磁场之间的相互作用由电子的磁矩 $\mu_e=\frac{2eS}{m_e c}$ 和外磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\hat{x}$ 决定. 相互作用哈密顿算符为

$$H_{int}=\mu_e\cdot\boldsymbol{B}=\frac{2eB_0}{m_e c}\boldsymbol{S}\cdot\hat{x}=\frac{2eB_0}{m_e c}S_x \tag{9.14.1}$$

利用自旋态的两分量表示(见第七章)

$$\begin{cases}|+z\rangle\rightarrow\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ |-z\rangle\rightarrow\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{cases} \tag{9.14.2}$$

在这个表示中,电子自旋可由泡利矩阵表达

$$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{9.14.3}$$

其中

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\+\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{9.14.4}$$

利用(9.14.4),(9.14.1)可写成

$$H_{int}=\frac{e\hbar B_0}{m_e c}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} \tag{9.14.5}$$

(b) 为了构造 $t$ 时刻的电子态,我们需要求解薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t}=H|\psi\rangle \tag{9.14.6}$$

态 $|\psi\rangle$ 可写成

$$|\psi(t)\rangle=\alpha_+(t)|+z\rangle+\alpha_-(t)|-z\rangle \tag{9.14.7}$$

其中 $\alpha_+^2+\alpha_-^2=1$. 或将其写成两分量形式

$$|\psi(t)\rangle=\alpha_+(t)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\alpha_-(t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\\alpha_-(t)\end{pmatrix} \tag{9.14.8}$$

利用(9.14.5)和(9.14.8),薛定谔方程(9.14.6)可写成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\\alpha_-(t)\end{pmatrix}=\frac{\hbar eB_0}{m_e c}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\\alpha_-(t)\end{pmatrix}=\frac{\hbar eB_0}{m_e c}\begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\\alpha_-(t)\end{pmatrix} \tag{9.14.9}$$

方程(9.14.9)等价于下面的2个方程:

$$\text{Ⅰ}\quad \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\alpha_+(t)}{\mathrm{d}t}=\omega_0\alpha_-(t),\quad \text{Ⅱ}\quad \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}\alpha_-(t)}{\mathrm{d}t}=\omega_0\alpha_+(t) \tag{9.14.10}$$

其中 $\omega_0=eB_0/m_e c$. 将(9.14.10Ⅱ)求导后得到

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}^2\alpha_-(t)}{\mathrm{d}t^2}=\omega_0\frac{\mathrm{d}\alpha_+(t)}{\mathrm{d}t} \tag{9.14.11}$$

从(9.14.11)和(9.14.10Ⅰ)我们得到

$$\frac{\mathrm{d}^2\alpha_-(t)}{\mathrm{d}t^2}=-\omega_0^2\alpha_-(t) \tag{9.14.12}$$

同理

$$\frac{d^2 a_+(t)}{dt^2} = -\omega_0^2 a_+(t) \tag{9.14.13}$$

(9.14.12)和(9.14.13)的解为

$$\begin{cases} a_+(t) = a_+ \cos(\omega_0 t) + b_+ \sin(\omega_0 t) \\ a_-(t) = a_- \cos(\omega_0 t) + b_- \sin(\omega_0 t) \end{cases} \tag{9.14.14}$$

这里 $a_\pm$ 和 $b_\pm$ 是由初始条件决定的常数. 初始条件为

$$|\psi(t=0)\rangle = |+z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{9.14.15}$$

所以 $a_+ = 1$, $a_- = 0$. 由 $a_+^2 + a_-^2 = 1$ 我们得到 $b_+ = 0$ 和 $b_- = 1$. 而(9.14.14)的解为

$$\begin{cases} a_+(t) = \cos(\omega_0 t) \\ a_-(t) = \sin(\omega_0 t) \end{cases} \tag{9.14.16}$$

量子态(9.14.8)为

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 t) \\ \sin(\omega_0 t) \end{pmatrix} \tag{9.14.17}$$

在 $T$ 时段后,电子态变为

$$|\psi(T)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 T) \\ \sin(\omega_0 T) \end{pmatrix} \tag{9.14.18}$$

由于D只能探测到自旋极化沿 $z$ 轴负向的电子. 如果我们要求所有的电子都能够被D探测到,我们必须有

$$|\psi(t)\rangle = |-z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{9.14.19}$$

从(9.14.17),(9.14.18)我们得到 $|\cos(\omega_0 T)| = 0$ 和 $|\sin(\omega_0 T)| = 1$. 或等价地

$$\omega_0 T = \frac{\pi}{2} + \pi n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{9.14.20}$$

利用 $\omega_0 = eB_0/m_e c$ 我们最后得到

$$B_0 = \frac{m_e c}{eT}\left(\frac{\pi}{2} + \pi n\right) \tag{9.14.21}$$

(c) 由(9.14.20)给出的 $B_0$ 最小的正值对应于 $n=0$ 的情况*.

$$(B_0)_{min} = \frac{\pi m_e c}{2eT} \tag{9.14.22}$$

设 $B_0$ 由(9.14.22)给出,$T/2$ 时段后的量子态为

$$|\psi(T/2)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 T/2) \\ \sin(\omega_0 T/2) \end{pmatrix} \tag{9.14.23}$$

利用(9.14.22)我们得到

$$\omega_0 = \frac{e(B_0)_{min}}{m_e c} = \frac{\pi}{2T} \tag{9.14.24}$$

这样从(9.14.23)和(9.14.24)我们得到

* 原著误写为 $n=1$——译者注.

$$|\psi(T/2)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 T/2) \\ \sin(\omega_0 T/2) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{9.14.25}$$

探测器 D 中探测到电子的概率为

$$P_D = |\langle -z | \psi(T/2)\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(0,\ 1)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2} \tag{9.14.26}$$

**9.15** 这个题目研究的是氢原子的能级在静磁场中的变化——Zeeman 效应. 设电子的质量为 $m$,电荷为 $q$. 忽略电子自旋(正常 Zeeman 效应). (a)记 $H_0$ 为无磁场时氢原子中电子的哈密顿算符,写出 $H_0$ 与 $L^2$ 和 $L_z$ 的共同本征态. 这些本征态对应的本征值是什么? (b)假定这个原子被放置在一个沿 $z$ 轴的均匀磁场 $B_0$ 中,写出新的哈密顿算符. 在(a)中给出的那些态是否还是新哈密顿算符的本征态? 它们的能级是怎样变化的? 假定 $\frac{q^2B^2}{8m}(x^2+y^2)$ 相对于 $\frac{\mu_B}{\hbar}B_0L_z$ 可以忽略(其意义在计算过程中自明).

**解** (a)氢原子哈密顿算符的本征态可以写成下型:

$$\phi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)\,Y_l^m(\theta,\phi) \tag{9.15.1}$$

其中 $n$ 给出能级 $E_n = -E_I/n^2$. 氢原子的能级是简并的:对于每一个 $n$, $l=0,1,2,\cdots,n-1$;而 $m$ 是 $-l$ 到 $l$ 间的整数. 能级 $E_n$ 的简并度为 $n^2$(不考虑自旋). 波函数 $\phi_{nlm}$ 是 $L^2$ 和 $L_z$ 的共同本征态,本征值分别为 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$.

(b)从习题 9.13 中得知,新的哈密顿算符可写成 $H_0$ 和 $H_1$ 的和. 这里

$$H_1 = -\frac{\mu}{\hbar}B_0L_z + \frac{q^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2) \tag{9.15.2}$$

我们假定(9.15.2)中的第二项相对与第一项来说可以忽略. 由于 $\phi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 是 $L_z$ 的本征态,我们有

$$(H_0+H_1)\phi_{nlm}(\boldsymbol{r}) = H_0\phi_{nlm}(\boldsymbol{r}) - \frac{\mu}{\hbar}B_0L_z\phi_{nlm}(\boldsymbol{r}) = (E_n - m\mu B_0)\phi_{nlm}(\boldsymbol{r}) \tag{9.15.3}$$

我们发现 $\phi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 还是新哈密顿算符的本征态,但是能量已经移动了 $m\mu B_0$. 由于磁场的加入,简并也被解除了.

**9.16** 如图 9-1 所示:一个电子被约束在半径为 $R$ 的一维圆环上运动. 在圆环的中心有一个 $z$ 方向上的静磁通量 $\Phi$. (a) 构造圆环上的一个与 $\phi$ 无关的矢势 $\mathbf{A}$;(b)写出电子的薛定谔方程;(c)电子波函数的一般边界条件是什么? (d)用 $e^{i\lambda\phi}$ 形式的函数构造电子的本征态,并求出对应的本征能量.

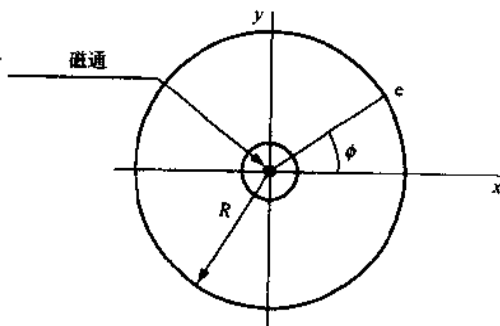



图 9-1

**解** (a) 磁场 $\boldsymbol{B}=B\hat{z}$ 通过以圆环 $r=R$ 为边界的曲面的磁通量为

$$\Phi = \int_{环内} \mathrm{d}x \int \boldsymbol{B}\cdot\hat{n}\,\mathrm{d}y = \int_{环内} \mathrm{d}x \int \boldsymbol{B}\cdot\hat{z}\,\mathrm{d}y \tag{9.16.1}$$

我们需要构造 $\boldsymbol{A}$ 使得 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$,并使 $\boldsymbol{A}$ 在圆环 $\boldsymbol{\rho}=R$ 上的取值与 $\phi$ 无关. 由(9.16.1)得到

$$\Phi = \iint_S (\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\hat{z}\,\mathrm{d}S \tag{9.16.2}$$

其中 $S$ 是圆环内部的区域. 利用 Stokes 定理,我们将(9.16.2)改写成

$$\Phi = \oint_C \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{9.16.3}$$

其中 $C$ 是 $S$ 的边界,也就是圆环 $\rho=R$; $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 沿 $C$ 而取. 这里

$$\mathrm{d}\boldsymbol{l} = (R\mathrm{d}\phi)\hat{\phi} \tag{9.16.4}$$

其中 $\hat{\phi}$ 是圆环沿反时针方向的单位切矢量. 由(9.16.3)和(9.16.4)我们得出

$$\Phi = \int_0^{2\pi} A_\phi R\,\mathrm{d}\phi \tag{9.16.5}$$

利用 $\boldsymbol{A}$ 与 $\phi$ 无关的条件,我们从(9.6.5)得到 $\Phi=2\pi RA_\phi$. 最后我们得出

$$\begin{cases} A_\rho = A_z = 0 \\ A_\phi = \dfrac{\Phi}{2\pi R} \end{cases} \tag{9.16.6}$$

(b) 考虑对称性,取柱坐标系进行计算较为方便. 要给出薛定谔方程,我们首先要写出柱坐标系中的梯度算符($\nabla$)的表达式

$$\nabla = \hat{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \hat{\phi}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z} \tag{9.16.7}$$

其中 $\hat{\rho}$, $\hat{\phi}$ 和 $\hat{z}$ 分别是 $\rho$、$\phi$ 和 $z$ 方向上的单位矢量. 由于电子是约束在圆环上运动的,我们有 $\rho=R=\text{const}$, $z=\text{const}$. 这样,$\nabla$ 在(9.16.7)中非零的部分为 $\hat{\phi}\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\phi}$. 在圆环上运用(9.16.6)和(9.16.7),我们得到

$$H = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi R}\right)^2 = \frac{1}{2mR^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{e}{c}\frac{\phi}{2\pi}\right)^2 \tag{9.16.8}$$

圆环上的薛定谔方程如下

$$\frac{1}{2mR^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi}\right)^2\psi(\phi) = E\psi(\phi) \tag{9.16.9}$$ *

(c) 由于 $\phi$ 的定义域长度为 $2\pi$,因此用 $\phi$ 写出的定义在全空间中的任意单值函数作为 $\phi$ 的函数都应该有周期 $2\pi$,** 由此得到 $|\psi(\phi+2\pi)|=|\psi(\phi)|$ 和关于 $\frac{\partial\psi}{\partial\phi}$ 的类似的关系式. 我们只关心模长——因为在量子力学中只有 $|\psi|^2$ 才有真实的物理意义.

---

* 这里的说法在数学和物理上都有一些漏洞. 问题的关键在于是把题中待求的电子波函数当作一维圆环上的波函数还是三维空间中的波函数在圆环上的限制. 如将其当作一维圆环上的波函数,则哈密顿算符必须重新构造,不能从三维空间的算符通过限制到圆环上的方法得到;如将其当作三维空间中的波函数在圆环上的限制,则对 $\rho$ 和 $z$ 的导数不能随意取消. 这里的解决方案尽管是许多教科书中通用的,但却是一个逻辑混乱的错误方案. 而且在物理图像上也是有缺陷的. 就本题而言,译者倾向于将电子波函数理解成一维圆环上的波函数. 这样的话,(9.16.8) 和(9.16.9) 式就应该当成基本假设了 —— 译者注.

** 这一段的原文为"Since $\phi$ is defined over $2\pi$, the general boundary condition for any function of $\phi$ determines that the function will be periodic in $2\pi$,". 这段文字在数学上是不严格的. 现根据题意改正后意译——译者注.

(d) 我们来验证 $\psi(\phi)=\frac{e^{ik\phi}}{N}$($k$ 为常数)是否是(9.16.9)的解. 首先计算归一化常数 $N$

$$R\int_0^{2\pi}|\psi(\phi)|^2\mathrm{d}\phi=\frac{2\pi R}{N^2}=1 \tag{9.16.10}$$

得到 $N=\frac{1}{\sqrt{2\pi R}}$. 然后将 $\psi(\phi)=\frac{e^{ik\phi}}{N}$代入(9.16.9)后得到

$$\frac{1}{2mR^2}\left[\hbar^2k^2-\hbar k\frac{e\Phi}{c\pi}+\left(\frac{e\Phi}{2\pi c}\right)^2\right]=E \tag{9.16.11}$$

或等价地

$$\left(\hbar k-\frac{e\Phi}{2\pi c}\right)^2=2mR^2E \tag{9.16.12}$$

定义 $\Phi_0=\frac{c}{e\hbar}$并将(9.16.12)写为

$$\left(k-\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2=\frac{2mR^2}{\hbar^2}E \tag{9.16.13}$$

从边界条件和 $\psi(\phi)=\frac{e^{ik\phi}}{N}$我们得到

$$2\pi k=2\pi n,\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{9.16.14}$$

从(9.16.13)和(9.16.14)我们得到能量本征值

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2mR^2}(n-\Phi/\Phi_0)^2 \tag{9.16.15}$$

和对应的本征态

$$\psi_n(\phi)=\frac{1}{2\pi R}e^{in\phi} \tag{9.16.16}$$

**9.17** 回到问题9.16中的等式(9.16.15)和(9.16.16). 圆环上的磁场为0(注意磁通量是在圆环内部但不是在圆环上的). (a)在经典力学中,在圆环上运动的粒子(电子)是不会受到圆环内部磁通量的影响的. 这个结论在量子力学中还保持正确吗? 电子的能量是否是磁通量 $\Phi$ 的函数? (b)画出基态的电子能量作为磁通量 $\Phi$(或 $\Phi/\Phi_0$)的函数的图像;(c)圆环上的流可由下式定义:

$$I=C\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\Phi} \tag{9.17.1}$$

其中 $H$ 是哈密顿算符而 $\Phi$ 是磁通量. 写出流算符 $I$ 的坐标表示;(d)计算 $I$ 在 $\psi_n$ 态中的平均值并建立能量和流在 $\psi_n$ 态中的平均值之间的关系.

**解答** (a) 从(9.16.15)式我们很容易看出电子的能量本征值与 $\Phi$ 有关. 这与经典力学的情况不同. 在量子力学中一个粒子的运动甚至能受一个在粒子运动的区域里为0的磁场影响. 这个令人惊奇的现象称为 Aharanov-Bohm 效应.

(b) 电子的能量本征值为

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2mR^2}(n-\Phi/\Phi_0)^2 \tag{9.17.2}$$

基态能量与 $\Phi$ 有关. 在 $-1/2<\Phi/\Phi_0<1/2$ 时,由(9.17.2)给出的最小能量对应于 $n=0$(见图 9-2);在 $1/2<\Phi/\Phi_0<3/2$ 时,由(9.17.2)给出的最小能量对应于 $n=1$;在 $3/2<\Phi/\Phi_0<5/2$ 时,$\psi_2$ 是基态;依此类推,在 $(2n-1)/2<\Phi/\Phi_0<(2n+1)/2$ 时,$\psi_n$ 是基态. 如图 9-2 所示,基态随 $\Phi/\Phi_0$ 以周期1变化.

(c) 由(9.17.1)和(9.16.8)得到

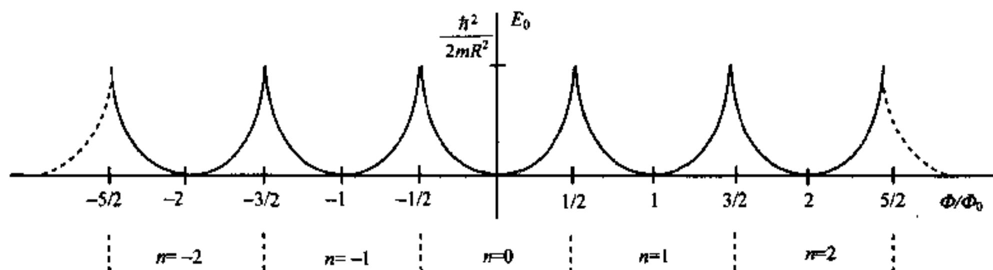



图 9-2

$$I=c\frac{\partial}{\partial\Phi}\left[\frac{1}{2mR^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi}\right)^2\right]=\frac{c}{mR^2}\left(-\frac{e}{2\pi c}\right)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi}\right)$$

$$=\frac{e\hbar}{4\pi^2mR^2}\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\tag{9.17.3}$$

(d) $I$ 的平均值为

$$\langle I\rangle_n=\int_0^{2\pi}\psi_n^*(\phi)[I\psi_n(\phi)]R\mathrm{d}\phi=\int_0^{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\phi}\left(\frac{e\hbar}{4\pi^2mR^2}\right)\left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}-\Phi/\Phi_0\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi}\right]R\mathrm{d}\phi$$

$$=\frac{e\hbar}{2\pi mR}(n-\Phi/\Phi_0)=-\frac{e\hbar}{mR}(n-\Phi/\Phi_0)\tag{9.17.4}$$

由(9.17.2)和(9.17.4)我们得到

$$E_n=\frac{m}{2}\left(\frac{\langle I\rangle_{(n)}}{e}\right)^2\tag{9.17.5}$$

## 补　充　习　题

**9.18**　一个电子在一个沿着 $z$ 轴方向、强度为 1 高斯的磁场的区域里运动. 假定这个区域可以看作是一个非常大的空箱，$0\leqslant x\leqslant L_x$，$-L_y\leqslant y\leqslant L_y$ 和 $0\leqslant z\leqslant L_z$. 试求在 $xy$ 平面上单位面积内的状态数.

**答案**　由(9.10.11)，$n=\frac{N}{\text{面积}}=80\frac{1}{m^2}$.

**9.19**　在不采用对称规范 $\boldsymbol{A}=\left(-\frac{By}{2},\frac{Bx}{2},0\right)$的条件下求解问题 9.8. 证明(9.8.16)中的能量本征值并不受影响*.

**答案**　$H=\frac{1}{2m}\left[\left(p_x+\frac{qB}{2c}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2c}x\right)^2+p_z^2\right]$.

**9.20**　利用公式(9.9.2)，对于有自旋和磁矩 $\mu_s$ 的带电粒子求解问题 9.3.

**答案**　(a) $H=\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$；(b) $\rho(\boldsymbol{r}_0)=\psi^*(\boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}_0)$；

(c) $$s=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{q}{mc}\boldsymbol{A}\psi^*\psi+\frac{\mu_sc}{S}\nabla\times(\psi^*\boldsymbol{S}\psi).\tag{9.20.1}$$

**9.21**　如按照下式定义电导率

$$\sigma=\frac{i_{\text{tot}}}{V}\tag{9.21.1}$$

其中 $i_{\text{tot}}$是单位长度上的总流强，而 $V$ 是电势.**考虑习题 9.12. 在该题的条件下，$\boldsymbol{E}=E\hat{y}$，$\phi=-Ey$，$V=2EL_y$. 沿 $x$ 轴方向的总流强为$(i_{\text{tot}})x=Ni_x$，其中 $N$ 是由(9.10.10)给出的朗道能级对应的状态数. 求出在该情况下的 $\sigma$.

---

* 原文在此有"as they must be"字样. 因此说法不确切而舍去——译者注.

** 在电磁学里我们是由 $\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}$ 来定义电导率的. 只是在习题 9.12 的特殊情况下(9.21.1)式才与 $\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}$ 吻合——译者注.

**答案** $\sigma = e^2/\hbar$.

**9.22** 考虑如下的谐振子的哈密顿算符

$$H_0 = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2 + y^2) \tag{9.22.1}$$

(a) 能否找到由 $H_0$ 和 $L_z$ 的公共本征态构成的基？(b)假定该谐振子带电荷 $q$ 并被放在均匀磁场 $\boldsymbol{B} = B_0\hat{z}$ 中. 在 $\boldsymbol{A} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}$ 规范下构造系统的哈密顿算符.

**答案** (a)能. 因为$[H_0, L_z] = 0$;

(b) $H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2m}\left[\left(\left(\frac{qB_0}{2c}\right)^2 + \frac{1}{2}m^2\omega_0^2\right)x^2 + \left(\left(\frac{qB_0}{2c}\right)^2 + \frac{1}{2}m^2\omega_0^2\right)y^2\right] + \frac{qB_0}{2mc}(p_xy - p_yx)$

**9.23** 回到习题9.22. (a)能否找到由9.22(b)中的哈密顿算符与 $L_z$ 的公共本征态构成的基？(b)9.22(a)中给出的基与本题(a)中给出的基是否相同?

**答案** (a)能. 因为$[H, L_z] = 0$;(b)不同. 因为$[H_0, H] \neq 0$.

**9.24** 考虑在强度为$10^4$ 高斯的均匀磁场中的氢原子. 计算氢原子在 $3d$ 和 $2p$ 能级间的跃迁所对应的3种辐射波长.

**答案** $E_1 = \Delta E_{32}$; $E_2 = \Delta E_{32} + \frac{e\hbar}{2mc}B$; $E_3 = \Delta E_{32} - \frac{e\hbar}{2mc}B$. $\lambda_1 = 6500\text{Å}$; $\lambda_{2,3} = 6500 \pm 0.2\text{Å}$.

# 第十章 量子力学问题的解法——部分 A

## 10.1 定态微扰论

"保守"的量子力学系统(哈密顿算符不显含时间)的研究归结为求解哈密顿算符的本征方程. 某些简单的系统——如谐振子——具有严格解. 而一般的方程却无法用解析的办法求解. 对于这些方程,我们必须寻找各种近似解法,这些解法通常要应用计算机来进行数据处理.

在本节中我们研究的是应用而相当广阔的定态微扰论. 在物理学中经常应用类似的方法来处理问题. 我们首先给出这个方法的基本思路,而这必须研究在初阶近似下被忽略的系统的高阶效应.

微扰论适用于哈密顿算符可以写成如下形式的系统:

$$H = H_0 + \lambda W \tag{10.1}$$

其中 $H_0$ 的本征态和本征值已知,而 $\lambda$ 是一个参数. 算符 $\lambda W$ 必须"远远小于"$H_0$:也就是说 $\lambda W \ll H_0$ 或 $\lambda \ll 1$ 必须满足,而 $W$ 的各个矩阵元应该与 $H_0$ 的相应的矩阵元具有同等的重要性——说得明确一点,$W$ 的各个矩阵元的大小应该与 $H_0$ 的本征值之间的间隙差不多.

**未微扰态**:我们假定未微扰的能量($H_0$ 的本征值)构成分立谱 $E_p^0$ 其中 $p$ 是一个整数指标. 我们记 $E_p^0$ 对应的本征态为 $|\phi_p^i\rangle$,其中附加指标 $i$ 在本征值 $E_p^0$ 简并时用来区分 $E_p^0$ 对应的各个线性无关的本征态. 此即

$$H_0 \mid \phi_p^i\rangle = E_p^0 \mid \phi_p^i\rangle \tag{10.2}$$

这里 $|\phi_p^i\rangle$ 构成态空间的一组正交完备基*

$$\begin{cases} \langle \phi_p^i \mid \phi_q^j\rangle = \delta_{pq}\delta_{ij} \\ \sum\sum \mid \phi_p^i\rangle\langle\phi_p^i \mid = 1 \end{cases} \tag{10.3}$$

**微扰带来的影响**:当 $\lambda = 0$ 时,$H(\lambda)$ 就等于未微扰的哈密顿算符 $H_0$. $H(\lambda)$ 的本征值 $E(\lambda)$ 一般与 $\lambda$ 有关. 图 10-1 给出了当 $\lambda$ 变化时 $E(\lambda)$ 的一种可能的变化方式.

在能级非简并时,微扰对能级可能有影响(如图 10-1 里的 $E_1^0$);也可能没有影响(如图 10-1 里的 $E_2^0$). 对于简并的能级,微扰可能把它"分裂"成不同的能级(如图 10-1 里的 $E_3^0$)——此时我们说微扰解除了能级的简并;也可能继续保持能级的简并(如图 10-1 里的 $E_4^0$).

**定态薛定谔方程的近似求解**:我们来构造哈密顿算符 $H(\lambda)$ 的本征值 $E(\lambda)$ 和本征态 $|\psi(\lambda)\rangle$.

$$H(\lambda) \mid \psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) \mid \psi(\lambda)\rangle \tag{10.4}$$

我们将假定 $E(\lambda)$ 和 $|\psi(\lambda)\rangle$ 可以按照下面的方法展开成 $\lambda$ 的幂级数:**

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \cdots + \lambda^q\varepsilon_q + O(\lambda^{q+1}) \tag{10.5}$$

---

* 原著中无"完备"二字. 而(10.3)的第二个式子就是 $|\phi_p^i\rangle$ 的完备性关系——译者注.

** 这实际上相当于寻找(10.4)具有(10.5)和(10.6)形式的特解. (10.4)的解当然不一定都能写成这种形式,对于那些解我们应该运用别的方法来构造——译者注.

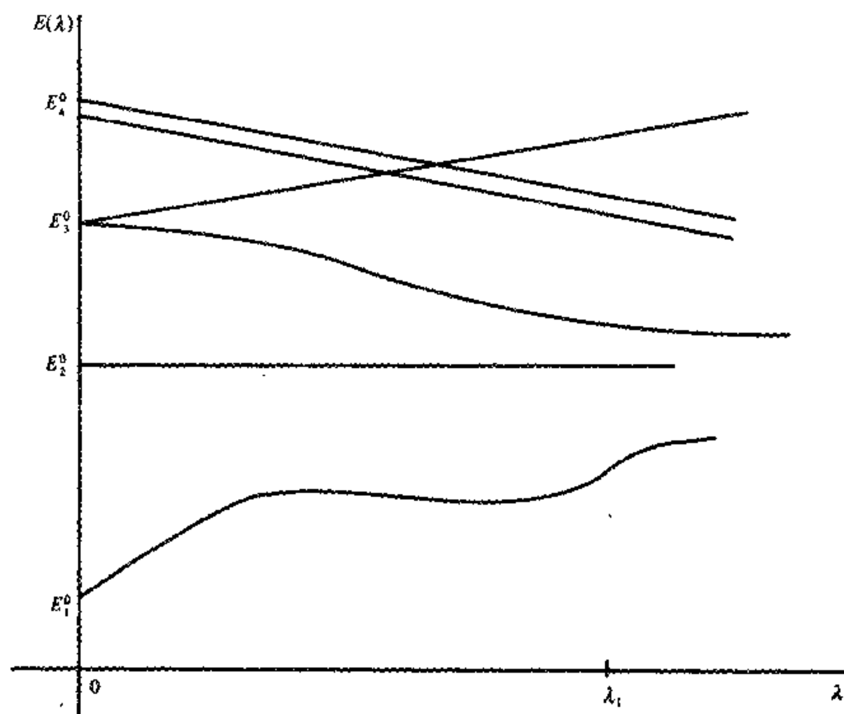



图 10-1

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda\,|1\rangle + \cdots + \lambda^q\,|q\rangle + O(\lambda^{q+1}) \tag{10.6}$$

当参数 $\lambda=0$ 时，我们得到 $H_0$ 的能级和相应的本征态．在 $\lambda\ll1$ 时，展开式(10.5)和(10.6)中的每一项都远远小于前面一项，在实际应用中只要取前面的少数项就足够了．含 $\lambda$ 的项被称为一阶修正，含 $\lambda^2$ 的项被称为二阶修正，依此类推．

### 10.2　非简并能级的微扰

设 $E_n^0$ 是未微扰哈密顿算符 $H_0$ 对应于本征态 $|\phi_n\rangle$ 的一个非简并能级(可以差一个常数相因子)．下式给出了能级和本征态的一阶和二阶修正(此公式将在习题 10.1 中导出)：

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda\langle\phi_n\,|\,W\,|\,\phi_n\rangle + \lambda^2\sum_{p\neq n}\sum_i \frac{|\langle\phi_p^i\,|\,W\,|\,\phi_n\rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} + O(\lambda^3) \tag{10.7}$$

$$\begin{aligned}|\psi_n(\lambda)\rangle = {} & |\phi_n\rangle + \lambda\sum_{p\neq n}\sum_i \frac{\langle\phi_p^i\,|\,W\,|\,\phi_p\rangle}{E_n^0 - E_p^0}\,|\phi_p^i\rangle \\ & + \lambda^2\sum_{p\neq n}\sum_i\Bigg[-\frac{\langle\phi_p^i\,|\,W\,|\,\phi_p\rangle\langle\phi_p^i\,|\,W\,|\,\phi_p\rangle}{(E_n^0 - E_p^0)^2} \\ & + \sum_{q\neq n}\sum_i \frac{\langle\phi_p^i\,|\,W\,|\,\phi_q^j\rangle\langle\phi_q\,|\,W\,|\,\phi_n\rangle}{(E_n^0 - E_p^0)(E_n^0 - E_q^0)}\Bigg]\,|\phi_p^i\rangle + O(\lambda^3)\end{aligned} \tag{10.8}$$

注意：能级的一阶修正正好就是微扰项 $\lambda W$ 在未微扰态 $|\phi_n\rangle$ 中的平均值．

### 10.3　简并能级的微扰

假定能级 $E_n^0$ 是 $g_n$ 重简并的．我们来给出计算能级的一阶修正和本征态的零阶修正的方法．——这个方法的详细推导见习题 10.8．

将 $\langle\phi_n^i\,|\,W\,|\,\phi_p^{i'}\rangle$ 排成一个 $g_n\times g_n$ 矩阵($i$ 为行指标而 $i'$ 为列指标)．这个矩阵 $W^{(n)}$ 实际上

是 $W$ 在基 $\{|\phi_p^i\rangle\}$ 上表出的矩阵的"一部分". 注意 $W^{(n)}$ 是由 $E_n^0$ 对应的本征态张成的 $g_n$ 维空间中的算符,它并不等于 $W$. $W^{(n)}$ 的本征值给出了能级 $E_n^0$ 的一阶修正 $\varepsilon_1^j$,而 $W^{(n)}$ 的本征矢量给出了对应于 $E_n^0$ 的本征态的零阶修正.

记 $\varepsilon_1^j$ 为 $W^{(n)}$ 的特征方程的根(即 $W^{(n)}$ 的本征值). 简并的能级 $E_n^0$ 现在分裂成了 $f_n^{(1)}$ 个离散的子能级

$$E_{nj}(\lambda) = E_n^0 + \lambda\varepsilon_1^j, \quad j = 1, 2, \cdots, f_n^{(1)} \leqslant g_n \tag{10.9}$$

若 $f_n^{(1)} = g_n$,则一阶微扰完全解除了能级的简并;若 $f_n^{(1)} < g_n$,则简并只是部分解除. $f_n^{(1)}$ 可以为 1 .

设子能级 $E_{nj}(\lambda) = E_n^0 + \lambda\varepsilon_1^j$ 是 $q$ 重简并的,此时有 $q$ 个线性无关的 $W^{(n)}$ 的本征矢量与之对应. 我们分两种不同的情况来考虑.

1. 如果只有一个精确的能级 $E(\lambda)$ 在一阶近似下等于 $E_{n,j}$,而且这个能级是 $q$ 重简并的. [例如在图 10-1]中 $E_4^0$ 能级在 $\lambda\to 0$ 过程中始终是 2 重简并的. ]此时 $H(\lambda)$ 的零阶近似本征态无法惟一确定,因为我们只知道这个本征态属于 $H(\lambda)$ 对应于 $E(\lambda)$ 的那个 $q$ 维本征子空间. 这种情况在 $H(\lambda)$ 和 $\lambda W$ 具有相同的对称性时经常发生,这个现象称为 $H(\lambda)$ 的本征简并.

2. 第 2 种可能是有若干个不同的精确能级 $E(\lambda)$ 在一阶近似下都等于 $E_{n,j}$. 这些能级之间的差异要在二阶或高阶的微扰计算中才能显现出来. 此时 $H(\lambda)$ 对应于这些能级的本征向量在一阶近似 $\lambda\to 0$ 时都趋近于某一个 $E_{n,j}$ 对应的 $W^{(n)}$ 的本征向量. 但是 $E_{n,j}$ 对应的 $W^{(n)}$ 的任意一个本征矢量却不一定是真实本征矢量的一阶近似.

## 10.4　含时微扰论

考虑一个哈密顿算符为 $H_0$ 的物理系统. 我们假定 $H_0$ 的本征值谱是非简并的分立谱(本节得到的公式也可以推广到其他的情况). 即

$$H_0 \mid \phi_n\rangle = E_n \mid \phi_n\rangle \tag{10.10}$$

设 $H_0$ 与时间无关. 但从 $t=0$ 时刻开始,系统被加上了一个与时间有关的微扰项

$$H(t) = H_0 + \lambda W(t) \tag{10.11}$$

其中 $\lambda$ 为参数,$\lambda \ll 1$, $W(t)$ 是一个在 $t<0$ 时为 0 的与 $H_0$ 同一数量级的算符. 设系统的初态为 $H_0$ 对应于本征值 $E_i$ 的本征态. 我们给出在一阶近似下系统处在 $H_0$ 的另一个本征态 $|\phi_f\rangle$ 中的概率 $P_{if}(t)$ 的公式. 这个公式的导出见习题 10.12.

$$P_{if}(t) = \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t')dt'\right|^2 \tag{10.12}$$

其中 $\omega_{if}$ 为由下式定义的玻尔角频率:

$$\omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar} \tag{10.13}$$

$W_{if}(t)$ 是 $W(t)$ 的矩阵元

$$W_{fi}(t) = \langle\phi_f \mid W(t) \mid \phi_i\rangle \tag{10.14}$$

我们考虑初态 $|\phi_i\rangle$ 到对应于连续谱中的能量 $E_f$ 对应的末态 $|\phi_f\rangle$ 中的跃迁. 此时 $t$ 时刻的跃迁概率 $|\langle\phi_f|\psi(t)\rangle|^2$ 实际上是概率密度. 我们必须把概率密度对末态的区域[即所有末态构成的集合]进行积分才能得到有物理意义的结果.

含时微扰论的一个非常重要的推论是 Fermi 金律,这个公式是在常微扰的情况下导出的.

在这种情况下,跃迁只能在能量相同的态之间发生. 从$|\phi_i\rangle$到$|\phi_f\rangle$之间的跃迁概率 $P_{if}$随时间线性增加,且有

$$\frac{\mathrm{d}P_{fi}(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle\phi_f|W(t)|\phi_i\rangle|^2\rho(E_f) \tag{10.15}$$

其中 $\rho(E_f)$是末态的态密度.

## 例 题 解 答

**10.1** 导出定态微扰论中能量的一阶修正和二阶修正的公式. 同时给出本征态的一阶修正. 假定能级非简并.

**解** 我们将哈密顿算符写成下型 $H=H_0+\lambda W$,其中 $H_0$ 是未微扰系统的哈密顿算符,$W$ 是微扰($\lambda\ll1$). 我们假定微扰系统的本征态$|\psi(\lambda)\rangle$和本征能量 $E(\lambda)$可以展开成 $\lambda$ 的幂级数*

$$|\psi(\lambda)\rangle=|0\rangle+\lambda|1\rangle+\cdots+\lambda^q|q\rangle+O(\lambda^{q+1}) \tag{10.1.1}$$

$$E(\lambda)=\varepsilon_0+\lambda\varepsilon_1+\cdots+\lambda^q\varepsilon_q+O(\lambda^{q+1}) \tag{10.1.2}$$

代入薛定谔方程后得到

$$(H_0+\lambda W)\Big[\sum_{q=0}^{\infty}\lambda^q|q\rangle\Big]=\Big[\sum_{q'=0}^{\infty}\lambda^{q'}\varepsilon_{q'}\Big]\Big[\sum_{q=0}^{\infty}\lambda^q|q\rangle\Big] \tag{10.1.3}$$

令 $\lambda$ 的各阶幂前面的系数相等,我们得到

$$H_0|0\rangle=\varepsilon_0|0\rangle \tag{10.1.4}$$

$$(H_0-\varepsilon_0)|1\rangle+(W-\varepsilon_1)|0\rangle=0 \tag{10.1.5}$$

$$(H_0-\varepsilon_0)|2\rangle+(W-\varepsilon_1)|1\rangle-\varepsilon_2|0\rangle=0 \tag{10.1.6}$$

对于一般的 $n$,我们有

$$(H_0-\varepsilon_0)|n\rangle+(W-\varepsilon_1)|n-1\rangle-\varepsilon_2|n-2\rangle+\cdots-\varepsilon_n|0\rangle=0 \tag{10.1.7}$$

注意$|\psi(\lambda)\rangle$的模长和相位是可以随意选取的,我们需要将$|\psi(\lambda)\rangle$归一化并选取相因子使得$\langle0|\psi(\lambda)\rangle$为实数. 由此可导出[注:这是计算到 $\lambda^2$ 阶的结果]

$$\langle0|0\rangle=1,\quad\langle0|1\rangle=\langle1|0\rangle=0,\quad\langle0|2\rangle=\langle2|0\rangle=\frac{1}{2}\langle1|1\rangle \tag{10.1.8}$$

对于一般的 $n$,我们有[注:这是计算到 $\lambda^n$ 阶的结果]

$$\langle0|n\rangle=\langle n|0\rangle=-\frac{1}{2}(\langle n-1|1\rangle+\langle n-2|2\rangle+\cdots+\langle2|n-2\rangle+\langle1|n-1\rangle) \tag{10.1.9}$$

在 $\lambda\to0$ 时,我们有 $\varepsilon_0=E_n^{(0)}$. 此时利用(10.1.4),我们看出$|\phi_n\rangle$正比于$|0\rangle$,于是我们可以取$|\phi_n\rangle=|0\rangle$. 将(10.5)式用$\langle\phi_n|$左乘

$$\langle\phi_n|(H_0-\varepsilon_0)|1\rangle+\langle\phi_n|(W-\varepsilon_1)|0\rangle=0 \tag{10.1.10}$$

(10.1.10)的第一项为零;由此得出

$$\varepsilon_1=\langle\phi_n|W|0\rangle=\langle\phi_n|W|\phi_n\rangle \tag{10.1.11}$$

近似到一阶时,我们有

$$E_n(\lambda)=E_n^{(0)}+\lambda\langle\phi_n|W|\phi_n\rangle+O(\lambda^2) \tag{10.1.12}$$

我们看出能量的一阶修正就简单等于微扰项 $W$ 在未微扰态$|\phi_n\rangle$里的平均值. 将(10.5)式用基矢$\langle\phi_n|$左乘,我们得到

* 请参看(10.5)和(10.6)式的译者注——译者注.

$$\langle\phi_p \mid (H_0 - E_n^{(0)} \mid 1\rangle + \langle\phi_p \mid (W - \varepsilon_1) \mid \phi_n\rangle = 0 \quad (p \neq n) \tag{10.1.13}$$

这给出方程

$$(E_p^{(0)} - E_n^{(0)})\langle\phi_p \mid 1\rangle + \langle\phi_p \mid W \mid \phi_n\rangle = 0 \tag{10.1.14}$$

利用基矢的正交关系,得到,

$$\langle\phi_p \mid 1\rangle = \frac{1}{E_p^{(0)} - E_n^{(0)}}\langle\phi_p \mid W \mid \phi_n\rangle \quad (p \neq n) \tag{10.1.15}$$

由于$\langle\phi_n|1\rangle = \langle 0|1\rangle = 0$,我们得出

$$\mid 1\rangle = \sum_{p\neq n}\frac{\langle\phi_p \mid W \mid \phi_n\rangle}{E_p^{(0)} - E_n^{(0)}} \mid \phi_p\rangle \tag{10.1.16}$$

修正到一阶的相应于未微扰态$|\phi_n\rangle$的 $H$ 的本征态可写成下型:

$$\mid \psi_n(\lambda)\rangle = \mid \phi_n\rangle + \lambda\sum_{p\neq n}\frac{\langle\phi_p \mid W \mid \phi_n\rangle}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} \mid \phi_p\rangle + O(\lambda^2) \tag{10.1.17}$$

要给出能量的二阶修正,将(10.1.6)式左乘$\langle\phi_n|$

$$\langle\phi_n \mid (H_0 - E_n^{(0)} \mid 2\rangle + \langle\phi_n \mid (W - \varepsilon_1) \mid 1\rangle - \varepsilon_2\langle\phi_n \mid \phi_n\rangle = 0 \tag{10.1.18}$$

这给出 $\varepsilon_2 = \langle\phi_n|W|1\rangle$. 将(10.1.16)代入$|\psi(\lambda)\rangle$,我们得到

$$\varepsilon_2 = \sum_{p\neq n}\frac{\langle\phi_p \mid W \mid \phi_n\rangle}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} \tag{10.1.19}$$

计算到二阶的能量为

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda\langle\phi_n \mid W \mid \phi_n\rangle + \lambda^2\sum_{p\neq n}\frac{|\langle\phi_p \mid W \mid \phi_n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} + O(\lambda^3) \tag{10.1.20}$$

**10.2** 考虑一个在二维对称无限深势阱里运动的粒子. 该粒子受到一个微扰 $W = Cxy$,其中 $C$ 为常数. (a)未微扰系统的本征能量和本征态是什么? (b)计算能量的一阶修正;(c)给出第一激发态的波函数. *

**解** (a) 未微扰系统的波函数和本征能量为(参照第三章)

$$\psi_{n_1,n_2}^{(0)}(x, y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi n_1 x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi n_2 y}{L}\right) \tag{10.2.1}$$

$$E_{n_1,n_2}^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2 + n_2^2) \tag{10.2.2}$$

(b) 此处原文为:The first-order correection to the energy is given by

$$\Delta E_{n_1,n_2}^{(1)} = \langle\psi_{n_1,n_2}^{(0)} \mid W \mid \psi_{n_1,n_2}^{(0)}\rangle \tag{10.2.3}$$

Thus,

$$\Delta E_{n_1,n_2}^{(1)} = \frac{4C}{L^2}\int_0^L x\sin\left(\frac{\pi n_1}{L}x\right)^2 dx\int_0^L y\sin\left(\frac{\pi n_1}{L}\right)^2 dy = \frac{L^2 C}{4} \tag{10.2.4}$$

由于二维对称无限深势阱的能级一般是简并的. 因此必须应用简并能级的微扰论来进行处理——如本题(c)中所做的那样. 这里的做法是错误的. 因此译者将问题的这一解答删去.

(c) 为构造第一激发态对应的波函数,需要计算如下的矩阵元

$$\langle\psi_{1,2}^{(0)} \mid W \mid \psi_{1,2}^{(0)}\rangle = \langle\psi_{2,1}^{(0)} \mid W \mid \psi_{2,1}^{(0)}\rangle = \frac{1}{4}L^2C^2 \tag{10.2.5}$$

和

$$\langle\psi_{1,2}^{(0)} \mid W \mid \psi_{2,1}^{(0)}\rangle = \langle\psi_{2,1}^{(0)} \mid W \mid \psi_{1,2}^{(0)}\rangle = \frac{256}{81\pi^4}L^2C^2 \tag{10.2.6}$$

---

* 由于第一激发态是简并的,所求的是零阶近似下的第一激发态的波函数——译者注.

这样,对应的 $W$ 的本征方程可以写成

$$L^2C^2\begin{pmatrix}\frac{1}{4} & \frac{256}{81\pi^4}\\ \frac{256}{81\pi^4} & \frac{1}{4}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\end{pmatrix} \tag{10.2.7}$$

其中 $\lambda_{1,2}=\left(\frac{1}{4}\pm\frac{256}{81\pi^4}\right)L^2C^2$, $u_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$, $u_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$或 $u_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$, $u_2=-\frac{1}{\sqrt{2}}$. 注意第一激发态是2重简并的,两个零阶近似波函数是

$$\psi^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1,2}^0+\psi_{2,1}^0),\quad \psi^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1,2}^{(0)}-\psi_{2,1}^{(0)}) \tag{10.2.8}$$

**10.3** 考虑一个弹性系数为 $k$,约化质量为 $m$ 的谐振子. 加在谐振子上的微扰项为 $W=ax^3$. 计算波函数的一阶修正和本征能量最低阶的非零修正.

**解答** 系统的哈密顿算符为

$$H=H_0+W=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx}+\frac{1}{2}kx^2+ax^3 \tag{10.3.1}$$

未微扰哈密顿算符的本征能量为 $E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$,对应的本征态为

$$\phi_n^{(0)}(x)=\sqrt{\frac{1}{2^nn!}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}}\,e^{-\alpha x^2/2}H_n(\sqrt{\alpha}x) \tag{10.3.2}$$

其中 $\alpha\equiv m\omega/\hbar$, $H_n$ 是厄米多项式. 由于在计算能级的一阶修正时,我们必须计算奇函数在实轴上的积分,而这个积分是0,所以我们得到 $E_n^{(1)}=\langle n|ax^3|k\rangle=0$. 对于能级的二阶修正,我们有

$$E_n^{(2)}=\sum_{k\neq n}\frac{|\langle n|W|k\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{|\langle n|ax^3|n+3\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_{n+3}^{(0)}}+\frac{|\langle n|ax^3|n+1\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}}$$
$$+\frac{|\langle n|ax^3|n-1\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}}+\frac{|\langle n|ax^3|n-3\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_{n-3}^{(0)}} \tag{10.3.3}$$

这个结论的导出需要借助于 $|\langle n|ax^3|m\rangle|^2=a\sum_k\langle n|x^2|k\rangle\langle k|x|m\rangle$. 所需的矩阵元为

$$\langle n|ax^3|n+3\rangle=a\langle n|x^2|n+2\rangle\langle n+2|x|n+3\rangle=a\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{(2\alpha)^3}} \tag{10.3.4}$$

$$\langle n|ax^3|n+1\rangle=a[\langle n|x^2|n+2\rangle\langle n+2|x|n+1\rangle+\langle n|x^2|n\rangle\langle n|x|n+1\rangle]$$
$$=3a\sqrt{\frac{(n+1)^3}{8\alpha^3}} \tag{10.3.5}$$

$$\langle n|ax^3|n-1\rangle=a\langle n|x^2|n-2\rangle\langle n-2|x|n-1\rangle+\langle n|x^2|n\rangle\langle n|x|n-1\rangle$$
$$=3a\sqrt{\frac{n^3}{8\alpha^3}} \tag{10.3.6}$$

和

$$\langle n|ax^3|n-3\rangle=a\langle n|x^2|n-2\rangle\langle n-2|x|n-3\rangle=a\sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{8\alpha^3}} \tag{10.3.7}$$

代入(10.3.3),得到

$$E_n^{(2)}=-\frac{15a^2}{4\hbar\omega\alpha^3}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right) \tag{10.3.8}$$

在计算波函数的一阶修正时也要用到上述矩阵元. 计算结果是

$$\phi_n = \phi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n}\frac{|\langle k|W|n\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\phi_k^0 + O(a^2) = \phi_n^{(0)} + \frac{a}{2\hbar\omega\alpha}\left[\frac{1}{3}\sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{2\alpha}}\phi_{n-3}^{(0)}\right.$$

$$\left. + 3n\sqrt{\frac{n}{2\alpha}}\phi_{n-1}^{(0)} - 3(n+1)\sqrt{\frac{n+1}{2\alpha}}\phi_{n+1}^{(0)} - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{2\alpha}}\phi_{n+3}^{(0)}\right] + O(a^2) \tag{10.3.9}$$

**10.4** 考虑一个在宽为 $a$ 的一维无限深势阱里运动的质量为 $m$ 的粒子

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0\leqslant x\leqslant a \\ \infty, & 其余 \end{cases} \tag{10.4.1}$$

加在粒子上的微扰形式如下：

$$W(x) = \alpha\omega_0\delta(x - a/2) \tag{10.4.2}$$

这里 $\alpha$ 是一个有能量量纲的实常数. (a)计算能级到 $\omega_0$ 一阶的修正. (b)本问题不用微扰论也可以求解. 构造本问题的严格解. 定义 $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$. 证明系统可能的能级由下面两个式子中的任一个给出：

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \text{ 或 } \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = -\frac{\hbar^2 k}{m\alpha\omega_0} \tag{10.4.3}$$

这些结果是怎样依赖于 $\omega_0$ 的绝对值和符号的？在 $\omega_0\to 0$ 时，验证(a)中的结果.

**解答**　(a)未微扰系统的能量本征值和本征函数由下式给出：

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right),\quad E_n^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2} \tag{10.4.4}$$

能量本征值的一阶修正为

$$\begin{aligned}\Delta E_n^{(1)} &= \langle\psi_n^{(0)}|W|\psi_n^{(0)}\rangle \\ &= \frac{2}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n x}{a}\right)\alpha\omega_0\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)dx \\ &= \begin{cases} 2\omega_0, & n\ 奇 \\ 0, & n\ 偶\end{cases}\end{aligned} \tag{10.4.5}$$

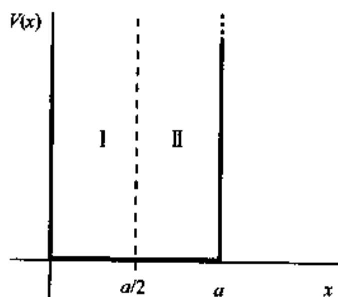



图 10-2

(b) 为求本问题的严格解，如图 10-2 所示，我们将势阱分割成两个区域：Ⅰ和Ⅱ. Ⅰ区和Ⅱ区的波函数分别是 $\psi_{\mathrm{I}} = A\sin(kx)$，$\psi_{\mathrm{II}} = B\sin[k(a-x)]$ 从边界条件 $\psi_{\mathrm{I}}(x=a/2) = \psi_{\mathrm{II}}(x=a/2)$ 推出 $A=B$. 利用归一化条件 $\int_0^a|\psi(x)|^2dx = 1$，有 $A=B=\sqrt{2\pi n/a^2}$. 从 $\psi'_{\mathrm{I}}(x=a/2)$和 $\psi'_{\mathrm{II}}(x=a/2)$的导数跃变条件，我们得到

$$\begin{aligned}\psi'_{\mathrm{I}}(x=a/2) &= \psi'_{\mathrm{II}}(x=a/2) - \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{a/2-\epsilon}^{a/2+\epsilon}W(x)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(kx)dx \\ &= \psi'_{\mathrm{II}}(x=a/2) - \frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{2a}\omega_0\sin(ka/2)\end{aligned} \tag{10.4.6}$$

此即

$$k\cos(ka/2) = -k\cos(ka/2) - \frac{2m\alpha\omega_0}{\hbar^2}\sin(ka/2)$$

这样

$$2k\cos(ka/2) = -\frac{2m\alpha\omega_0}{\hbar^2}\sin(ka/2) \Rightarrow \tan(ka/2) = -\frac{\hbar^2 k}{m\alpha\omega_0} \tag{10.4.7}$$

在 $\sin(ka/2)=0$ 时,我们得到对于 $k=\pi n/2$ 的未微扰解,其中 $n$ 是偶数.在 $\omega_0\to 0$ 时,$-\hbar^2/ma\omega_0\to\pm\infty$;对于奇数的 $n$,(10.4.7)在 $ka/2=\pi/2+n\pi$ 或 $k=\pi n/a$ 时满足.在 $n$ 为奇数时引入 $z=-ka/2+n\pi/2$. 此时 $\tan(ka/2)=\cot z$. 利用 $\cot z$ 在 0 附近的展开式,我们得到

$$\cot z\approx\frac{1}{z}=\frac{1}{\pi n/2-ka/2}=\tan\left(\frac{ka}{2}\right)=-\frac{\hbar^2 k}{ma\omega_0}\tag{10.4.8}$$

利用(10.4.7)中最后一个等式,导出

$$k^2-\left(\frac{\pi n}{a}\right)k-\frac{2m\omega_0}{\hbar^2}=0\tag{10.4.9}$$

和 $k_{1,2}=\frac{1}{2}\left(\frac{\pi n}{a}\pm\sqrt{\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2+\frac{8m\omega_0}{\hbar^2}}\right)$, 应用关系

$$k=\frac{1}{2}\left(\frac{\pi n}{a}+\sqrt{\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2+\frac{8m\omega_0}{\hbar^2}}\right)\tag{10.4.10}$$

和如下的展开式 $\sqrt{1+\varepsilon}=1+\frac{\varepsilon}{2}+\cdots(\varepsilon\ll 1)$,我们得到

$$k=\frac{1}{2}\left(\frac{\pi n}{a}+\frac{\pi n}{a}\sqrt{1+\left(\frac{a}{\pi n}\right)^2\frac{8m\omega_0}{\hbar^2}}\right)\approx\frac{\pi n}{a}+\frac{2m\omega_0}{\pi\hbar^2 n}\tag{10.4.11}$$

能量本征值为

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\approx\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}+2\omega_0\tag{10.4.12}$$

(10.4.12)右边的第一项对应于未微扰的能量本征值,第二项就是我们在(a)中得到的一阶修正.

**10.5** 一个质量为 $m$ 的粒子在边长为 $L$ 的二维方箱里运动. 箱子里有一个由下式给出的弱势场

$$V(x,y)=V_0L^2\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\tag{10.5.1}$$

(a) 计算基态能量的一阶修正;(b) 给出基态能量的二阶修正和基态波函数的一阶修正的表达式. 在 $(x_0,y_0)=(L/2,L/2)$ 时你应该如何进行具体计算? (c)在 $V_0$ 阶上给出第一激发态的能量的表达式,在 $(x_0,y_0)=(L/4,L/4)$ 时能级的劈裂有多大? (d)对于第一激发态,找出 $V(x,y)$ 中的点 $(x_0,y_0)$,使得能级简并不被解除. 用对称性解释你所得到的结果.

**解** (a) 系统未微扰态的本征函数和本征值是(见第三章)

$$\psi^{(0)}(x,y)=\frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi k}{L}y\right),\ E_{nk}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n^2+k^2)\tag{10.5.2}$$

基态是非简并的,但是由于 $E_{12}^{(0)}=E_{21}^{(0)}$,第一激发态是简并的. 对于基态,能量的一阶修正为

$$\begin{aligned}E_{11}^{(1)}&=\langle\psi_{11}^{(0)}\mid V\mid\psi_{11}^{(0)}\rangle=\frac{4}{L^2}\int_0^L\int_0^L\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y}{L}\right)V_0L^2\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\&=4V_0\sin^2\left(\frac{\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{L}\right)\end{aligned}\tag{10.5.3}$$

(b) 基态的二阶修正为

$$\begin{aligned}E_{11}^{(2)}&=\sum_{\substack{n,k\\(n,k)\neq(1,1)}}\frac{|\langle\psi_{nk}^{(0)}\mid V\mid\psi_{11}^{(0)}\rangle|^2}{E_{11}^{(0)}-E_{n,k}^{(0)}}\\&=\sum_{\substack{n,k\\(n,k)\neq(1,1)}}\frac{\left|\frac{4}{L^2}\iint\sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi ky}{L}\right)V_0L^2\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right|^2}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2-n^2-k^2)}\end{aligned}$$

$$= \sum_{\substack{n,k \\ (n,k)\neq(1,1)}} \frac{\left[4V_0\sin\left(\frac{\pi n x_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi k y_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y_0}{L}\right)\right]^2}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2-n^2-k^2)} \tag{10.5.4}$$

对于$(x_0, y_0)=(L/2, L/2)$,我们有

$$E_{11}^{(2)} = \sum_{\substack{n,k \\ (n,k)\neq(1,1)}} \frac{16V_0^2\sin\left(\frac{\pi n}{2}\right)^2\sin^2\left(\frac{\pi k}{2}\right)}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2-n^2-k^2)} = \frac{32V_0^2 2mL^2}{\pi^2\hbar^2}\left(\sum_{\substack{n,k \\ (n,k)\neq(1,1)}} \frac{1}{(2-n^2-k^2)}\right) \tag{10.5.5}$$

基态的一阶修正为

$$\begin{aligned}
|\psi_{11}^{(1)}\rangle &= \sum_{\substack{n,k \\ (n,k)\neq(1,1)}} \frac{\langle\psi_{nk}^{(0)}|V|\psi_{11}^{(0)}\rangle}{E_{11}^{(0)}-E_{nk}^{(0)}}|\psi_{nk}^{(0)}\rangle \\
&= \sum_{\substack{n,k \\ (n,k)\neq(1,1)}} \frac{1}{\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(2-n^2-k^2)}\left[\iint\frac{4}{L^2}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right)V_0L^2\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\right. \\
&\quad \left.\times\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi k y}{L}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right]\frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi k y}{L}\right) \\
&= \sum_{\substack{n,k \\ (n,k)\neq(1,1)}} \frac{4V_0\sin\left(\frac{\pi x_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi n x_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi k y_0}{L}\right)}{\frac{\pi^2\hbar^2(2-n^2-k^2)}{2mL^2}}\frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi k y}{L}\right)
\end{aligned} \tag{10.5.6}$$

回到 $x_0=y_0=L/2$ 情况. 代入 $n=2p+1$ 和 $k=2q+1$,我们有

$$\psi_{11}^{(1)} = \sum_{p,q=0}^{\infty} \frac{4mLV_0}{\pi^2\hbar^2(p^2+q^2+p+q)}(-1)^{p+q}\sin\left[\frac{(2p+1)\pi x}{L}\right]\sin\left[\frac{(2q+1)\pi y}{L}\right] \tag{10.5.7}$$

(c) 第一激发态是简并的,$E_{12}^{(0)}=E_{21}^{(0)}$;由 10.3 节,久期方程为

$$\begin{vmatrix} V_{12,12}-E_{12}^{(1)} & V_{12,12} \\ V_{21,12} & V_{21,21}-E_{12}^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{10.5.8}$$

由此得到

$$E_{12}^{(1)} = \frac{1}{2}\left[V_{12,12}+V_{21,21}\pm\sqrt{(V_{12,12}-V_{21,21})^2+4|V_{12,21}|^2}\right] \tag{10.5.9}$$

其中 $V_{nm}-\langle n|V(x,y)|m\rangle$

$$V_{nk,lm} = 4V_0\sin\left(\frac{\pi n x_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi k y_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi l x_0}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi m y_0}{L}\right) \tag{10.5.10}$$

对于 $x_0=y_0=L/4$,我们有 $V_{12,12}=V_{12,21}=V_{21,12}=V_{21,21}=2V_0$,由此

$$E_{12}^{(1)} = \frac{1}{2}\left[2V_0+2V_0\pm\sqrt{(2V_0-2V_0)^2+4(2V_0)^2}\right] = \begin{cases}0 \\ 4V_0\end{cases} \tag{10.5.11}$$

(d) 当下式满足时第一激发态的简并不会解除:

$$(V_{12,12}-V_{21,21})^2+4|V_{12,21}|^2 = 0 \tag{10.5.12}$$

由此

$$\left[\sin^2\left(\frac{\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi y_0}{L}\right)-\sin^2\left(\frac{2\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{L}\right)\right]^2$$
$$+4\sin^2\left(\frac{\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi y_0}{L}\right) = 0$$

$$\sin^2\left(\frac{\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{2\pi y_0}{L}\right)+\sin^2\left(\frac{2\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{L}\right)$$

$$=0\Rightarrow\sin\left(\frac{2\pi x_0}{L}\right)=\sin\left(\frac{2\pi y_0}{L}\right)=0 \tag{10.5.13}$$

由于每个 $x_0$ 和 $y_0$ 都必须取下面的值:0, $L$ 和 $L/2$. 通过任意组合我们得到二维箱子中的 9 个点. 只有在这 9 个点上加上本题中的微扰才不会改变系统的对称性.

**10.6** 一个质量为 $m$ 的粒子,哈密顿算符由下式给出

$$H=\begin{cases}\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{m\omega^2r^2}{2}, & 0\leqslant r\leqslant a\\ \dfrac{p^2}{2m}, & r>a\end{cases} \tag{10.6.1}$$

其中 $r=\sqrt{x^2+y^2}$. 利用微扰论给出基态能量的二阶修正.

**解** 将哈密顿算符写成下型:

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2r^2+V(r)=H_0+V(r) \tag{10.6.2}$$

其中微扰项为

$$V=\begin{cases}0, & 0\leqslant r\leqslant a\\ -m\omega^2r^2/2, & r>a\end{cases} \tag{10.6.3}$$

$H_0$ 的基态波函数为 $\phi_{00}(r)=\sqrt{\frac{2}{\lambda^2}}\sqrt{r}\exp\left(-\frac{r^2}{2\lambda^2}\right)$, 其中 $\lambda=\sqrt{\hbar/m\omega}$, $E_n^{(0)}=\hbar\omega$(在记号 $\phi_{00}$ 中一个下标"0"代表的是未微扰的哈密顿算符的本征函数,而另一个下标"0"表示基态. ). 计算到一阶,我们有

$$E_0=\hbar\omega-\frac{2}{\lambda^2}\int_a^\infty\left(\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right)\exp\left(-\frac{r^2}{\lambda^2}\right)r\mathrm{d}r=\hbar\omega-\frac{\hbar\omega}{2}\left[-\exp\left(\frac{r^2}{\lambda^2}\right)\left(1+\frac{r^2}{\lambda^2}\right)\Big|_a^\infty\right] \tag{10.6.4}$$

或 $E_0=\hbar\omega-\frac{\hbar\omega}{2}\left[1+\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right]\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right)$. 当 $\hbar\omega\ll m\omega^2a^2$ 时这个结果是有意义的. 计算到二阶,第一个对能级修正有贡献的态是能量为 $3\hbar\omega$ 的 $\phi_{10}(r)$. 它满足

$$-\frac{1}{2\hbar\omega}\left(\int_a^\infty\phi_{10}(r)\left(-\frac{m\omega^2r^2}{2}\right)\phi_{00}(r)r\mathrm{d}r\right)^2=-\frac{1}{2\hbar\omega}\left[-\frac{\hbar\omega}{2}\left\{\exp\left(-\frac{r^2}{\lambda^2}\right)\left(1+\frac{r^2}{\lambda^2}+\frac{r^4}{\lambda^4}\right)\Big|_a^\infty\right\}\right]^2$$

$$=-\frac{\hbar\omega}{8}\left[\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right)\left(1+\frac{m\omega a^2}{\hbar}+\frac{m^2\omega^2a^4}{\hbar^2}\right)\right]^2 \tag{10.6.5}$$

这样我们有下面的近似结果: *

$$E_0\cong\hbar\omega-\frac{\hbar\omega}{2}\left(1+\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{m\omega a^2}{\hbar}\right)-\frac{\hbar\omega}{8}\left(1+\frac{m\omega a^2}{\hbar}+\frac{m^2\omega^2a^4}{\hbar^2}\right)^2\exp\left(-\frac{2m\omega a^2}{\hbar}\right) \tag{10.6.6}$$

这种分析方式只有在 $E>m\omega^2a^2/2$ 时才失效.

**10.7** 考虑一个三维状态空间的问题. 在取定的一组正交基下哈密顿算符由下面的矩阵给出

$$\widetilde{H}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&3&0\\0&0&-2\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&C&0\\C&0&0\\0&0&C\end{pmatrix} \tag{10.7.1}$$

---

* 由于能级的二阶修正公式中包括无限求和,因此本题只能做近似计算——译者注.

这里 $\widetilde{H}=\widetilde{H}_0+\widetilde{H}_1$，$C$ 是一个常数，$C\ll 1$．(a)构造 $\widetilde{H}$ 的精确本征值；(b)利用二阶微扰论给出本征值；(c)比较(a)，(b)的结果．

**解** (a) $\widetilde{H}$ 的本征值是方程 $\det(\widetilde{H}-\lambda I)=0$ 的根

$$0=\begin{vmatrix}1-\lambda & C & 0\\ C & 3-\lambda & 0\\ 0 & 0 & C-2-\lambda\end{vmatrix}$$

$$=(C-2-\lambda)\begin{vmatrix}1-\lambda & C\\ C & 3-\lambda\end{vmatrix}$$

$$=(C-2-\lambda)[\lambda^2-4\lambda+3-C^2] \tag{10.7.2}$$

其中 $\lambda=C-2,\ 2\pm\sqrt{1+C^2}$．

(b) 能级的二阶修正可写为 $E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}$，即

$$(\widetilde{E})_i=(\widetilde{H}^0)_{ii}+(\widetilde{H}^1)_{ii}+\sum_{k\neq i}\frac{H^1_{ik}H^1_{ki}}{E_i^{(0)}-E_k^{(0)}} \tag{10.7.3}$$

易见$(H^0)_{ii}=1,\ 3$ 和 $-2$．能量的一阶修正由 $H^1_{11}=0, H^1_{22}=0, H^1_{33}=C$ 给出．对于二阶修正，我们得到

$$E_1^{(2)}=\frac{H^1_{12}H^1_{21}}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{H^1_{13}H^1_{31}}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}=\frac{C^2}{-2}+\frac{0}{3}=-\frac{C^2}{2} \tag{10.7.4}$$

$$E_2^{(2)}=\frac{H^1_{21}H^1_{12}}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{H^1_{23}H^1_{32}}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}=\frac{C^2}{3-1}+\frac{0\cdot 0}{3}=\frac{C^2}{2} \tag{10.7.5}$$

和

$$E_3^{(2)}=\frac{H^1_{31}H^1_{13}}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{H^1_{32}H^1_{23}}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}} \tag{10.7.6}$$

即

$$E_1=1-\frac{C^2}{2} \tag{10.7.7}$$

$$E_2=3+\frac{C^2}{2} \tag{10.7.8}$$

和

$$E_3=-2+C \tag{10.7.9}$$

(c) 将 $2\pm\sqrt{1+C^2}$ 展开

$$2\pm\sqrt{1+C^2}=2\pm\left(1+\frac{1}{2}C^2+\cdots\right)=3+\frac{1}{2}C^2,\ 1-\frac{1}{2}C^2\quad (C^2\ll 1) \tag{10.7.10}$$

这与(10.7.7)和(10.7.8)的结果吻合．

**10.8** 导出简并态的一阶微扰修正公式(见 10.3 节)．

**解** 假定能级 $E_p$ 是 $g$ 重简并的．我们有 $g$ 个正交的态矢

$$H_0\mid\phi_p^i\rangle=E_p\mid\phi_p^i\rangle \tag{10.8.1}$$

在 $H_0$ 上加上一个微扰 $\lambda W$，重新将 $|\phi_p^k\rangle$ 组合成 $|0\rangle$ 以便构造与之相关的一阶能级修正 $\varepsilon$ *

$$[H_0 + \lambda W]|0\rangle = (E_p + \lambda\varepsilon)|0\rangle \tag{10.8.2}$$

此即

$$\langle\phi_p^k | W | 0\rangle = \varepsilon\langle\phi_p^k | 0\rangle \tag{10.8.3}$$

利用 $|\phi_p^k\rangle$ 的正交完备性得到

$$\sum_{p'}\sum_{k'}\langle\phi_p^k | W | \phi_{p'}^{k'}\rangle\langle\phi_{p'}^{k'} | 0\rangle = \varepsilon\langle\phi_p^k | 0\rangle \tag{10.8.4}$$

由于 $|0\rangle$ 是 $H_0$ 本征值为 $E_p$ 的本征态，它与所有的 $|\phi_{p'}^{k'}\rangle$，$p'\neq p$ 正交. 由此

$$\sum_{k'}^{g}\langle\phi_p^k | W | \phi_p^{k'}\rangle\langle\phi_p^{k'} | 0\rangle = \varepsilon\langle\phi_p^k | 0\rangle \tag{10.8.5}$$

定义矩阵 $\{W^p\}$ 为

$$W_{ij}^p = \langle\phi_p^i | W | \phi_p^j\rangle \tag{10.8.6}$$

方程(10.8.5)等价于矢量方程 $W^p|0\rangle = \epsilon|0\rangle$. 这样 $\varepsilon$ 的可能取值就是下列方程的解：

$$\det(W^p - \lambda I) = 0 \tag{10.8.7}$$

**10.9** 一个质量为 $m$ 的电子在边长为 $a$ 的三维箱子里以能量 $3\pi^2\hbar^2/m^2$ 运动. 在 $z$ 轴方向上加上一个场强为 $\varepsilon$ 的弱电场；微扰项为 $W = e\varepsilon z$. 计算电子能量的一阶修正.

**解** 三维箱子里的自由电子的能量为 $\pi^2\hbar^2 n^2/2ma^2$，我们得到 $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 6$. 满足已知条件的3个 $(n_x, n_y, n_z)$ 分别为

$$(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 2)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = (1, 2, 1)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = (2, 1, 1) \tag{10.9.1}$$

相应的态是3重简并的. 相关的波函数为

$$\phi_{112} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right) \tag{10.9.2}$$

$$\phi_{121} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \tag{10.9.3}$$

和

$$\phi_{211} = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \tag{10.9.4}$$

注意到 $\langle 2, 1, 1|z|2, 1, 1\rangle = \langle 1, 2, 1|z|1, 2, 1\rangle = \langle 1, 1, 2|z|1, 1, 2\rangle$，以及

$$\begin{aligned}\langle 2, 1, 1 | z | 2, 1, 1\rangle &= \frac{8}{a^3}\int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)dy\int_0^a z\sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)dz \\ &= \frac{2}{a}\int_0^a z\sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)dz = \frac{a}{2}\end{aligned} \tag{10.9.5}$$

类似地可以证明 $\langle 2, 1, 1|z|1, 2, 1\rangle = \langle 2, 1, 1|z|1, 1, 2\rangle = \langle 1, 2, 1|z|1, 1, 2\rangle = 0$.

这样 $W$ 所有的非对角矩阵元都为零而微扰后的能级由下式给出：

$$E = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{e\varepsilon a}{2} \tag{10.9.6}$$

---

* 此处原文为"we seek the possible energy levels $\varepsilon$ corresponding to the first-order correction state $|0\rangle$". 这个说法是错误的. 在简并态的微扰中，由于存在不止一个具有同样的零阶能量但互相正交的状态，在(10.8.2)和(10.8.3)式中取 $\langle|0\rangle$ 为某一个 $|\phi_p^k\rangle$ 一般是不行的——从(10.8.3)式就可以看出，在此式右边为零时左边却不一定为零. 这就出现了矛盾. 因此在简并能级的微扰处理中我们首先要把 $|\phi_p^k\rangle$ 重新线性组合起来得到 $|0\rangle$，使得(10.8.2)和(10.8.3)式都不矛盾. 这才是(10.8.2)和(10.8.3)的真正含义——译者注.

**10.10** 一个氢原子被放置在一个沿着 $z$ 轴方向的均匀静电场 $\varepsilon$ 中. 描述这一相互作用的哈密顿算符为

$$W = -e\varepsilon z \tag{10.10.1}$$

在实验室里得到的典型电场都满足 $W \ll H_0$. 微扰将氢原子某些态的简并解除. 这个现象称为 Stark 效应. 计算 $n=2$ 的氢原子态的 Stark 效应.

**解** 在计算微扰对应的矩阵元之前,我们注意到只有在宇称不同的状态之间的微扰矩阵元才可能不为零. 在 $n=2$ 时,只有在 $l=0$ 和 $l=1$ 态之间的微扰矩阵元才可能非零. 利用对称性,两个态之间的 $m$ 必须相同. 即

$$\begin{array}{c} \quad 2s \qquad 2p,\ m=0 \qquad 2p,\ m=1 \qquad 2p,\ m=-1 \end{array}$$

$$W_s = \begin{pmatrix} 0 & \langle 2s \mid W \mid 2p,\ m=0\rangle & 0 & 0 \\ \langle 2p,\ m=0 \mid W \mid 2s\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{10.10.2}$$

通过简单的计算得到$\langle 2p,\ m=0 | W | 2s\rangle = 3ea_0\varepsilon$ 其中 $a_0$ 是玻尔半径. 由于矩阵元线性地依赖于 $\varepsilon$,这个修正称为线性 Stark 效应. 选择一组将微扰矩阵对角化的基:

$$\left\{ |2p,\ m=-1\rangle,\ |2p,\ m=1\rangle,\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s,\ m=0\rangle + |2p,\ m=0\rangle), \right.$$

$$\left. \frac{1}{\sqrt{2}}(2s,\ |m=0\rangle - |2p,\ m=0\rangle) \right\} \tag{10.10.3}$$

图 10-3 唯象地说明线性 Stark 效应是怎样解除 $n=2$ 的能级的简并的.

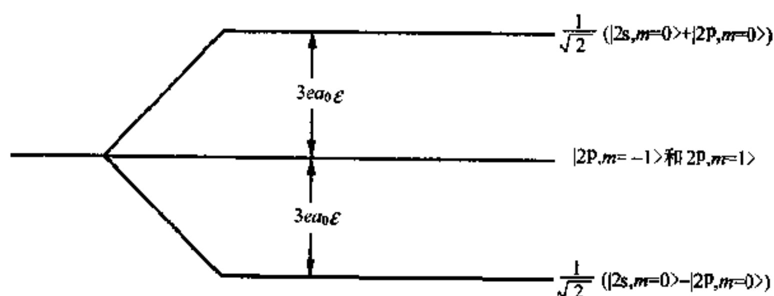



图 10-3

**10.11** 如图 10-4 所示是一个由 1 个 $A$ 原子和 3 个 $B$ 原子构成的四原子平面分子. 分子中的电子可以看作是在原子核附近运动的. 如果电子在 $A$ 核附近运动,设能量为 $E_1^{(0)}$;如果电子在 $B$ 核附近运动,设能量为 $E_2^{(0)}$,其中 $E_1^{(0)} < E_2^{(0)}$. 定义如下的状态:

$$|1\rangle = (1000),\ |2\rangle = (0100)$$
$$|3\rangle = (0010),\ |4\rangle = (0001) \tag{10.11.1}$$

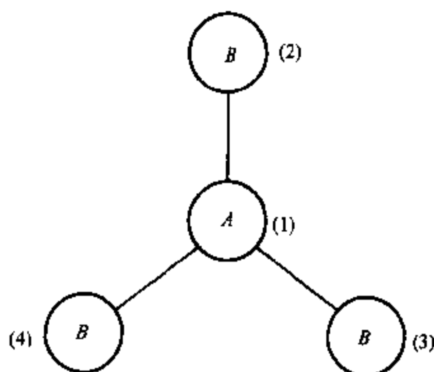



图 10-4

(a) 在一阶近似下,电子不能从一个原子移动到另外一个原子. 在由基$\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$张成的线性空间里给出电子近似的哈密顿算符 $H_0$;(b)假定电子能在 $A$ 原子和 $B$

原子间来回运动，但不能在 $B$ 原子之间运动. 记 $a$ 为电子在 $A$ 原子和 $B$ 原子之间运动对应的能量，此处 $a \ll E_1$. 试写出对应的微扰哈密顿算符；(c)利用微扰论计算 $|1\rangle$ 的二阶能级修正和 $|2\rangle$、$|3\rangle$、$|4\rangle$ 的一阶能级修正；(d)计算严格的能级修正，并证明在 $a \ll E_1$ 时此结果与(c)相符.*

**解**　(a) 在基 $\{|1\rangle、|2\rangle、|3\rangle、|4\rangle\}$ 中哈密顿算符 $H_0$ 可取为

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix} \tag{10.11.2}$$

(b) 微扰哈密顿算符 $W$ 给出了状态 $|1\rangle$ 到每一个状态 $|2\rangle$、$|3\rangle$、$|4\rangle$ 之间的跃迁.

$$W = \begin{pmatrix} 0 & a & a & a \\ a & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{10.11.3}$$

(c) 能级 $E_1^{(0)}$ 非简并. 由(10.7)，微扰 $W$ 引起的能级二阶修正为

$$E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + \langle 1 | W | 1 \rangle + \sum_{i=2}^{4} \frac{|\langle i | W | 1 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_i^{(0)}} = E_1^{(0)} + \frac{3a^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \tag{10.11.4}$$

能级 $|2\rangle$、$|3\rangle$、$|4\rangle$ 是3重简并的. 我们必须用简并态微扰论来处理. 由于 $W$ 在 $|2\rangle$、$|3\rangle$、$|4\rangle$ 之间的矩阵元为零，久期方程为

$$\det \begin{pmatrix} 0-\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0-\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0-\varepsilon \end{pmatrix} = 0 \tag{10.11.5}$$

此即 $-\varepsilon^2 = 0$. 从而能级 $E_2^{(0)}$ 的一阶修正为零

$$E_2^{(1)} = E_2^{(0)}, \quad E_3^{(1)} = E_2^{(0)}, \quad E_4^{(1)} = E_2^{(0)} \tag{10.11.6}$$

在一阶微扰下简并未被解除.

(d) 总哈密顿算符为

$$H = \begin{pmatrix} E_2^{(0)} & a & a & a \\ a & E_2^{(0)} & 0 & 0 \\ a & 0 & E_2^{(0)} & 0 \\ a & 0 & 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix} \tag{10.11.7}$$

为求 $H$ 的本征值，我们必须求解方程 $\det(H - \lambda I) = 0$. 直接计算得到

$$(E_1^{(0)} - \lambda)(E_2^{(0)} - \lambda)^3 - 3a^2(E_2^{(0)} - \lambda)^2 = 0 \tag{10.11.8}$$

和

$$(E_2^{(0)} - \lambda)^2[(E_1^{(0)} - \lambda)(E_2^{(0)} - \lambda) - 3a^2] = 0 \tag{10.11.9}$$

---

* 本题给出了分子的一个粗糙的唯象模型. 严格来说，本题的做法并无多少物理机制可言，只是为读者演示了"原来也可以如此"而已. 这种层次上的物理模型常被戏称为"toy model"——译者注.

我们有

$$\lambda_{1,2}=\frac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})\pm\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+12a^2}\right],\quad \lambda_{3,4}=E_2^{(0)}\tag{10.11.10}$$

我们发现,能级 $E_2^{(0)}$ 的简并只会部分解除,而不会被全部解除. 对于 $a\ll E_1^{(0)}$, 我们有

$$\lambda_{1,2}=\frac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})\pm(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})\sqrt{1+\frac{12a^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}}\right]$$

$$\cong\frac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})\pm(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})\left(1+\frac{6a^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}\right)\right]\tag{10.11.11}$$

由此

$$\lambda_1=E_1^{(0)}+\frac{3a^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}},\quad \lambda_2=E_2^{(0)}-\frac{3a^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\tag{10.11.12}$$

这个结果与 $E_1^{(0)}$ 的二阶修正(10.11.4)和 $E_2^{(0)}$ 的一阶修正吻合.

**10.12** 导出一阶含时微扰论下的跃迁概率公式.

**解** 记 $c_n(t)$ 为状态 $|\psi(t)\rangle$ 在基 $\{|\phi_n\rangle\}$ 中的分量

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle,\quad c_n(t)=\langle\phi_n|\psi(t)\rangle\tag{10.12.1}$$

定义 $W_{nk}=\langle\phi_n|W|\phi_k\rangle$,薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle=[H_0+\lambda W(t)]|\psi(t)\rangle\tag{10.12.2}$$

将(10.12.2)用 $\langle\phi_n|$ 左乘并利用(10.12.1),我们有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}c_n(t)}{\mathrm{d}t}=E_nc_n(t)+\sum_k\lambda W_{nk}(t)c_k(t)\tag{10.12.3}$$

引入 Bohr 角频率 $\omega_{nk}=(E_n-E_k)/\hbar$ 并将 $c_n(t)=a_n(t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E_nt}{\hbar}}$ 代入,(10.12.3)成为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_n(t)}{\mathrm{d}t}=\lambda\sum_k\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{nk}t}W_{nk}(t)a_k(t)\tag{10.12.4}$$

将 $a_n(t)$ 展开成 $\lambda$ 的幂级数

$$a_n(t)=a_n^{(0)}(t)+\lambda a_n^{(1)}(t)+\lambda^2a_n^{(2)}(t)+\cdots\tag{10.12.5}$$

我们来寻找展开到 $\lambda$ 一阶的解. 假定在 $t<0$ 时系统处在 $|\phi_i\rangle$ 态,则由(10.12.1)和 $c_n(t)$ 与 $a_n(t)$ 之间的关系我们有

$$a_n(t=0)=\delta_{ni}\tag{10.12.6}$$

将(10.12.5)代入(10.12.4)并令等式两边 $\lambda^r$ 项的系数相等,得到(利用(10.12.6))

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_n^{(1)}}{\mathrm{d}t}=\sum_k\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{nk}t}W_{nk}(t)\delta_{ki}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{ni}t}W_{ni}(t)\tag{10.12.7}$$

将方程(10.12.7)积分后得到

$$a_n^{(1)}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{nk}t'}W_{nk}(t')\mathrm{d}t'\tag{10.12.8}$$

由(10.12.1),状态 $|\phi_i\rangle$ 和状态 $\langle|\phi_f\rangle$ 之间的跃迁概率等于 $P_{if}(t)=|c_f(t)|$. 注意到 $a_f(t)$ 和 $c_f(t)$ 模长相同以及 $a_f(t)$ 近似到一阶的结果

$$a_f(t)=a_f^{(0)}(t)+\lambda a_f^{(1)}(t)\tag{10.12.9}$$

由于跃迁总是在不同的状态之间进行的,我们有 $a_f^{(0)}=0$. 再应用(10.12.8),最后得到

$$P_{if}(t)=\lambda^2|a_f^{(1)}(t)|^2=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\left|\int_0^t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}W_{fi}(t')\mathrm{d}t'\right|^2\tag{10.12.10}$$

**10.13** 考虑一个角频率为 $\omega_0$,电荷为 $q$ 的一维谐振子. 在 $t=0$ 时,振子处于基态. 在 $\tau$ 时间

段里加上一个电场,此时微扰哈密顿算符为

$$W(t)=\begin{cases}-q\varepsilon x, & 0\leqslant t\leqslant\tau\\ 0, & \text{其余}\end{cases}\tag{10.13.1}$$

其中 $\varepsilon$ 是电场强度而 $x$ 是位置算符.(a)利用一阶含时微扰论计算系统到 $n=1$ 状态的跃迁概率;(b)利用一阶含时微扰论证明到 $n=2$ 状态的跃迁是禁戒的.

**解** (a) 记 $P_{01}$ 为从基态到 $n=1$ 状态的跃迁概率,由一阶含时微扰论得到

$$P_{01}^{(1)}(\tau)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau e^{i\omega_{10}t}\langle 1\mid W\mid 0\rangle dt\right|^2=\left|\frac{1}{\hbar^2}\int_0^\tau e^{i\omega_{10}t}dt\int_{-\infty}^{\infty}\phi_1(x)(-q\varepsilon x)\phi_0(x)dx\right|^2\tag{10.13.2}$$

这里 $\phi_0(x)$和 $\phi_1(x)$分别是坐标表象里 $n=0$ 和 $n=1$ 的状态对应的能量本征函数. 利用第五章中得到的谐振子的有关结论我们有

$$\phi_0(x)=\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right]$$

$$\phi_1(x)=\frac{\sqrt{2}x}{\pi^{1/4}x_0^{3/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right]\tag{10.13.3}$$

其中 $x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. 将其代入(10.13.2),得到

$$P_{01}^{(1)}(\tau)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau e^{i\omega_0t}\left(-q\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\right)dt\right|^2=\frac{(q\varepsilon)^2}{2m\hbar\omega_0}\left|\int_0^\tau e^{i\omega_{10}t}dt\right|^2=\frac{(q\varepsilon)^2}{2m\hbar\omega_0}\left[\frac{\sin(\omega_0\tau/2)}{\omega_0/2}\right]^2\tag{10.13.4}$$

(b) 对于 $n=0$ 到 $n=2$ 的一阶跃迁,我们有

$$P_{02}^{(1)}(\tau)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau e^{i\omega_{20}t}\langle 2\mid W\mid 0\rangle dt\right|^2\tag{10.13.5}$$

应用 $x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger)$(见第五章),由此得到

$$\langle 2\mid W\mid 0\rangle=\langle 2\mid(-q\varepsilon x)\mid 0\rangle=-q\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle 2\mid(a^\dagger+a)\mid 0\rangle=0\tag{10.13.6}$$

最后得到 $P_{02}^{(1)}(\tau)=0$.

**10.14** 考虑一个在均匀电场中运动的一维谐振子. 这个微扰电场按如下的形式依赖于时间

$$\varepsilon(t)=\frac{A}{\sqrt{\pi}\tau}\exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right]\ (t>0)\tag{10.14.1}$$

其中 $A$ 是常数. 如果直到 $t=0$ 时刻加入电场之前振子都处于基态,利用一阶含时微扰论计算在上述微扰的作用下振子的激发概率.

**解** 利用外场的时间积分定义振子的动量增量 $p$

$$p=\int_{-\infty}^{\infty}e\varepsilon(t)dt=\frac{eA}{\sqrt{\pi}\tau}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(t/\tau)^2}dt=eA=\text{常数}\tag{10.14.2}$$

我们看出 $p$ 与 $\tau$ 无关. 这说明对于任意的 $\tau$,图 10-5 中曲线下的面积都是相同的.

从态 $n$ 到态 $k$ 的跃迁概率为

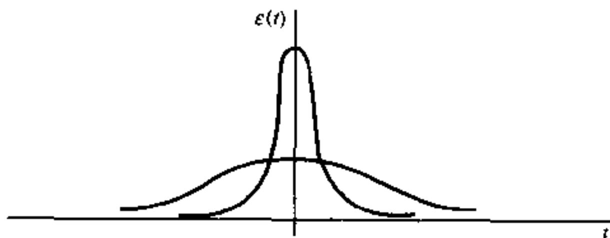



图 10-5

$$P_{nk} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt\right|^2 \tag{10.14.3}$$

其中 $V_{kn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)*} V \psi_n^{(0)} dx$ 是微扰矩阵元，$\omega_{kn} = | E_k^{(0)} - E_n^{(0)} | / \hbar$. 设 $e$、$m$ 和 $\omega$ 分别是谐振子的电荷、质量和自然频率；$x$ 为振子到平衡位置的偏离. 在均匀场中的微扰项由下式给出：

$$V(x, t) = -ex\varepsilon(t) \sim x \tag{10.14.4}$$

谐振子开始时处于基态($n=0$)，非零的微扰矩阵元为

$$V_{01} = V_{10} = -\frac{p}{\sqrt{\pi}\tau}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right] \tag{10.14.5}$$

在一阶微扰的意义下，均匀场只能诱导出基态到第一激发态的跃迁. 将(10.14.5)和 $\omega_{kn} = \omega_{10} = |E_k^{(0)} - E_n^{(0)}|/\hbar = \omega$ 代入(10.14.3)后得到

$$P_{01} = \frac{p^2}{2\pi\tau^2 m\hbar\omega}\left|\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i\omega t - \left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right]dt\right|^2 \tag{10.14.6}$$

应用等式 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta x - \alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\beta^2/4\alpha}$，我们有

$$P_{01} = \frac{p^2}{2m\hbar\omega}\exp\left[-\frac{1}{2}(\omega\tau)^2\right] \tag{10.14.7}$$

结论是：对于给定的经典的动量增量 $p$，激发概率随 $\tau$ 增加而减少；这样对于 $\tau \gg 1/\omega$，这个概率非常之小. 这种情况称为"绝热近似". 相反，对于迅变微扰 $\tau \ll 1/\omega$，这个概率几乎是常数. 注意极限 $\tau \to 0$ 下，

$$\lim_{\tau\to 0}\varepsilon(t) = A\delta(t) = \frac{p}{e}\delta(t) \tag{10.14.8}$$

我们得到突变形式的微扰. 在这一情况下，激发概率有如下的取值：

$$\lim_{\tau\to 0} P_{01} = \frac{p^2}{2m\hbar\omega} \tag{10.14.9}$$

正好等于经典动量增量对应的动能 $p^2/2m$ 与谐振子能隙 $\hbar\omega$ 之比. 微扰论的适用条件要求激发概率远远小于系统未被激发的概率

$$P_{01} \ll (1 - P_{01}) \quad 或 \quad P_{01} \ll 1 \tag{10.14.10}$$

由(10.14.7)我们得知

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{(eA)^2}{2m} \ll \hbar\omega \tag{10.4.11}$$

是(10.14.10)成立的充分条件. 而当场的变化足够缓慢时，$\tau \gg 1/\omega$，(10.14.11)作为微扰论成立的条

件就太严格了.*(此时 $p^2/2m$ 与 $\hbar\omega$ 同阶.)

**10.15** 考虑一个处在基态的谐振子. 假定此谐振子的平衡点从 $t=0$ 时刻开始随时间缓慢而匀速地运动并在 $t=T$ 时停止. 利用绝热近似给出谐振子被激发的概率. 找出这种近似处理成立的条件. (绝热近似就是假定微扰随时间的变化非常缓慢. 可以预计到在绝热近似下系统被激发的概率是非常小的.)

**解答** $t\geqslant 0$ 时的哈密顿算符为

$$H(t)=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2[x-a(t)]^2 \tag{10.15.1}$$

其中 $a(t)$ 是谐振子的平衡位置,按题意为 $v_0 t$,这里 $v_0=$ 常数是平衡点的移动速度. 哈密顿算符(10.15.1)的瞬时本征函数为

$$\psi_n=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a(t))^2\right]\mathrm{H}_n\left[-\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}[x-a(t)]\right] \tag{10.15.2}$$

由这些瞬时本征态计算出来的算符 $\frac{\partial H}{\partial t}=-m\omega^2 v_0[x-a(t)]$ 的矩阵元只有在 $n=0\to n=1$ 才不为零. (注意初态是基态)这个矩阵元是

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{10}=-m\omega^2 v_0\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{10.15.3}$$

显然,在平衡点移动时,系统的能级不发生改变,这意味着 $\omega$ 是常数.**将 $\omega_{10}=\omega$ 代入可得到第一激发态的概率振幅

$$C_1(t)\approx-\frac{1}{i\hbar\omega^2}m\omega^2 v_0\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}-1)=\mathrm{i}v_0\sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}-1) \tag{10.15.4}$$

$t$ 时刻系统处于第一激发态的概率为

$$P_1(t)=|C_1(t)|^2=\frac{mv_0^2}{\hbar\omega}(1-\cos(\omega t)) \tag{10.15.5}$$

注意这个概率是随时间振荡的. 在 $t\geqslant T$ 时,激发概率为

$$P_1(T)=\frac{mv_0^2}{\hbar\omega}(1-\cos(\omega T)) \tag{10.15.6}$$

绝热近似成立要求 $P_1(t)\ll 1$ 对于所有的 $t$ 都成立,这等价于如下条件:

$$v_0\ll\sqrt{\frac{\hbar\omega}{m}} \tag{10.15.7}$$

**10.16** 一个氢原子在 $t=0$ 时处于基态. 从此时开始在氢原子上加上一个均匀的周期电场. (a) 给出能使氢原子电离的最小的电场频率;(b) 利用微扰论计算单位时间的电离概率. 假定电离后的电子是自由电子.***

**解答** (a) 在周期微扰的作用下,从离散能谱的初态到连续能谱的末态单位时间里的跃迁概率如下:****

$$\mathrm{d}P_{n\nu}=\frac{2\pi}{\hbar}|V_{\nu n}|^2\delta(E_\nu-E_n^{(0)}-\hbar\omega)\mathrm{d}\nu \tag{10.16.1}$$

其中 $\omega$ 是周期微扰的频率;$n$ 是标识离散能谱的量子数;$\mathrm{d}\nu$ 是连续谱对应的无限小能量区间;$E_n^{(0)}$

---

* (10.14.11)本来就是在迅变场的条件下导出的,而当场的变化足够缓慢时,这个公式成立的前提已经被破坏了——译者注.

** 这个结论是绝热近似的推论. 并非严格的结果——译者注.

*** 由于氢原子的 Coulomb 力在 $r\to\infty$ 时下降较慢,这个假定是比较粗糙的——译者注.

**** 这个公式实际上是 Fermi 金律在简谐微扰下的推广,在原著的前面章节中并未给出——译者注.

是未微扰的分立能级；$E_v$ 是未微扰的连续能级；$V_{vn}$ 是所述跃迁的微扰算符的矩阵元. 微扰算符有下型：

$$\hat{W} = e(\boldsymbol{E}(t)\cdot\boldsymbol{r}) = e(\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r})\sin(\omega t) = \hat{V}\exp(-\mathrm{i}\omega t) + \hat{V}^*\exp(\mathrm{i}\omega t) \qquad (10.16.2)$$

其中 $\boldsymbol{E}(t)$为电场，$|\boldsymbol{E}_0|$为电场振幅，而 $\hat{V}$由下式给出：

$$\hat{V} = \frac{\mathrm{i}e}{2}\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r} \qquad (10.16.3)$$

(10.16.1)中的 δ 函数说明跃迁只有在 $E_v - E_n^{(0)} = \hbar\omega$ 时才发生. 此即

$$\omega_{\min} = \frac{1}{\hbar}(E_v - E_n^{(0)})_{\min} \qquad (10.16.4)$$

对于基态的氢原子，我们有

$$(E_v - E_n^{(0)})_{\min} = me^4/2\hbar^3 \qquad (10.16.5)$$

此式给出了能够使得氢原子电离的最小频率.

(b) 考虑矩阵元 $V_{vn} = \int\psi_v^*\hat{V}\psi_n^{(0)}\mathrm{d}^3r$. 我们取 $\psi_n^{(0)}$ 为氢原子的基态波函数

$$\psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\exp\left(\frac{-r}{a}\right) \qquad \left(a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right) \qquad (10.16.6)$$

$\psi_v$ 我们近似地将其取为

$$\psi_v \approx \frac{1}{\sqrt{8\pi^3}}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \qquad (10.16.7)$$

其中 $v = \hbar k^2/4\pi m$. $\psi_n^{(0)}$归一化到 1 而 $\psi_v$ 归一化到 $\delta(v-v')$. 代入 $V_{vn}$，我们得到

$$V_{vn} = \frac{\mathrm{i}e}{2}\frac{1}{\sqrt{8\pi^3}}\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int\exp\left(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{r}{a}\right)\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}^3r \qquad (10.16.8)$$

为计算积分，我们选取球坐标$(r,\theta,\phi)$. 假定 $\boldsymbol{k}$ 沿极轴方向，且 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{E}_0$ 之间的夹角为 $\chi$. 内积 $\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r}$ 为

$$\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r} = E_0r[\cos\chi\cos\theta + \sin\chi\sin\theta\cos(\phi-\phi_0)] \qquad (10.16.9)$$

其中 $\phi_0$ 是 $\boldsymbol{E}_0$ 的相应坐标. * 将(10.16.9)代入(10.16.8)(注意到 $z=\cos\theta$)，我们得到

$$V_{vn} = \frac{\mathrm{i}eE_0}{\pi\sqrt{(2a)^3}}\cos\chi\int_{-1}^{1}\left[\int_0^\infty\exp\left(-\mathrm{i}krz - \frac{r}{a}\right)r^3\mathrm{d}r\right]z\mathrm{d}z = \frac{eE_0\cos\chi}{\pi\sqrt{(2a)^3}}\frac{16a^5k}{(1+k^2a^2)^3} \qquad (10.16.10)$$

给出

$$\mathrm{d}v = \mathrm{d}^3\boldsymbol{k} = k^2\mathrm{d}k\mathrm{d}\Omega_k = k^2\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E_v}\mathrm{d}\Omega_k\mathrm{d}E_v = \frac{mk}{\hbar^2}\mathrm{d}\Omega_k\mathrm{d}E_v \qquad (10.16.11)$$

这里我们已经利用了 $E_v = \hbar^2k^2/2m$($\mathrm{d}\Omega_k$ 是沿$\boldsymbol{k}$ 方向的立体角元). 将(10.16.13),(10.16.14)代入(10.16.1)后得到

$$\mathrm{d}P_{nv} = \frac{|\boldsymbol{E}_0|^2k^3\cos^2\chi}{(1+k^2a^2)^6}\times\delta(E_v - E_n^{(0)} - \hbar\omega)\mathrm{d}\Omega_k\mathrm{d}E_v \qquad (10.16.12)$$

电子到波矢 $\boldsymbol{k}$ 方向的立体角元 $\mathrm{d}\Omega_k$ 内的电离概率可由(10.16.12)对 $\mathrm{d}E_0$ 积分得到. 根据(10.16.12)中 δ 函数的性质，我们只需要考虑 $E_v = E_n^{(0)} + \hbar\omega$ 的情况，此即

$$k^2 = \frac{2mE_v}{\hbar^2} = \frac{2m(\omega-\omega_{\min})}{\hbar} \qquad (10.16.13)$$

* 即假定 $\boldsymbol{E}_0$ 的方向向量为$(\sin\chi\cos\phi_0, \sin\chi\sin\phi_0, \cos\chi)$——译者注.

和 $1+k^2a^2=\omega/\omega_{min}$. 我们最后有

$$dP_k=\frac{64a^3}{\pi\hbar}\left(\frac{\omega_{min}}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_{min}}-1\right)^{3/2}E_0\cos^2\chi d\Omega_k \tag{10.16.14}$$

[由于(10.16.14)只依赖于 $k$,我们将这个概率记成 $dP_k$. ]利用$\overline{\cos^2\chi}=1/3$, * 将(10.16.14)对立体角积分,我们得到单位时间原子电离的总概率

$$P=\frac{256}{3}\frac{a^3}{\hbar}\left(\frac{\omega_{min}}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{3/2}E_0^2 \tag{10.16.15}$$

**10.17** 一个量子系统有 2 个定态$|1\rangle$和$|2\rangle$. 其能量本征值之差为 $E_2-E_1=\hbar\omega_{21}$. 在 $t=0$ 时,系统处于状态$|1\rangle$,从此时开始加上一个与时间无关的微扰 $H'$. 其对应的矩阵元由下式给出:

$$\langle 1|H'|1\rangle=0,\langle 2|H'|1\rangle=\hbar\omega_0,\langle 2|H'|2\rangle=-\hbar\omega \tag{10.17.1}$$

(a) 利用一阶含时微扰论,计算在 $t$ 时刻系统处于$|1\rangle$态和$|2\rangle$态的概率;(b)严格求解薛定谔方程,给出$|\psi(t)\rangle$;(c)系统 $t$ 时刻处于$|2\rangle$态的概率是多少? 什么时候(a)中的近似成立? 什么时候系统以概率 1 处于$|2\rangle$态中?

**解释**　(a) 应用一阶含时微扰论,我们可以计算 $P_{|1\rangle\to|2\rangle}$. 由于系统只有 2 个本征态,我们有

$$P_{|1\rangle\to|1\rangle}=1-P_{|1\rangle\to|2\rangle} \tag{10.17.2}$$

利用公式 $P_{if}^{(1)}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'}W_{fi}(t')dt'\right|^2$ 得到

$$\begin{aligned}P_{|1\rangle\to|2\rangle}&\cong\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{21}t'}\langle 2|H'|1\rangle dt'\right|^2=\frac{1}{\hbar^2}\hbar^2\omega_0^2\left|\int_0^t e^{i\omega_{21}t'}dt'\right|^2=\omega_0^2\left|\frac{1}{i\omega_{21}}(e^{i\omega_{21}t}-1)\right|^2\\&=\omega_0^2\left|\frac{e^{i\omega_{21}t/2}(e^{i\omega_{21}t/2}-e^{-i\omega_{21}t/2})}{i\omega_{21}}\right|^2=\omega_0^2\left|\frac{e^{i\omega_{21}t/2}2i\sin(\omega_{21}t/2)}{i\omega_{21}}\right|^2\\&=\omega_0^2|e^{i\omega_{21}t/2}|^2\left|\frac{\sin(\omega_{21}t/2)}{\omega_{21}/2}\right|^2=\omega_0^2\left|\frac{\sin(\omega_{21}t/2)}{\omega_{21}/2}\right|^2\end{aligned} \tag{10.17.3}$$

由于 $\omega_{21}t\ll1,P_{|1\rangle\to|2\rangle}\cong\omega_0^2t^2\ll1$,因而 $\omega_0t\ll1$. 这两个不等式就是一阶含时微扰论成立的条件. 作为推论我们有 $P_{|1\rangle\to|1\rangle}=1-P_{|1\rangle\to|2\rangle}\cong1$.

(b) **法 1　对角化哈密顿算符**　首先,我们写出哈密顿算符 $H=H_0+H'$在本征态$|1\rangle$和$|2\rangle$构成的基下的表达式

$$H=\begin{pmatrix}E_1 & \hbar\omega_0\\ \hbar\omega_0 & E_2-\hbar\omega_{21}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E_1 & \hbar\omega_0\\ \hbar\omega_0 & E_1\end{pmatrix} \tag{10.17.4}$$

其中我们已经应用了关系 $E_2-E_1=\hbar\omega_2$,本征方程为 $Hv=\lambda v$,即$(E_1-\lambda)^2-(\hbar\omega_0^2)=0$,也就是 $\lambda_{1,2}=E_1\pm\hbar\omega_0$. 两个相应的本征态为

$$v_1=\frac{1}{\sqrt2}=\frac{1}{\sqrt2\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}}(|1\rangle+|2\rangle),$$

$$v_2=\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt2}(|1\rangle-|2\rangle) \tag{10.17.5}$$

对于状态$|\psi(t)\rangle$,我们有

$$|\psi(t)\rangle=a_1e^{-i\lambda_1t/\hbar}|v_1\rangle+a_2e^{-i\lambda_2t}|v_2\rangle \tag{10.17.6}$$

---

* 原文为"We use the fact that $\cos^2\chi=1/3$". 这个结论是错误的. 现改正——译者注.

利用初始条件$|\psi(t=0)\rangle=|1\rangle$,我们得到 $a_1=a_2=1/\sqrt{2}$. 最后

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{2}(e^{-i(E_1+\hbar\omega_0)t/\hbar}+e^{-i(E_1-\hbar\omega_0)t/\hbar})|1\rangle+\frac{1}{2}(e^{-i(E_1+\hbar\omega_0)t/\hbar}-e^{-i(E_1-\hbar\omega_0)t/\hbar})|2\rangle$$

$$=e^{-iE_1t/\hbar}[\cos(\omega_0t)|1\rangle-i\sin(\omega_0t)|2\rangle] \tag{10.17.7}$$

**法 2　直接求解薛定谔方程**　将$|\psi(t)\rangle$写成下式:

$$|\psi(t)\rangle=C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle+C_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}|2\rangle \tag{10.17.8}$$

代入薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t}=(H_0+H')|\psi(t)\rangle$后得到

$$i\hbar\left[\dot{C}_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}+\frac{iE_1}{\hbar}C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}\right]|1\rangle+i\hbar\left[\dot{C}_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}-\frac{iE_2}{\hbar}C_2te^{-iE_1t/\hbar}\right]|2\rangle$$

$$=(H_0+H')[C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle+C_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}|2\rangle] \tag{10.17.9}$$

将(10.17.9)用$\langle 1|$左乘得到

$$i\hbar[\dot{C}_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}-\frac{iE_1}{\hbar}C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}]=C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}(\langle 1|H_0|1\rangle+\langle 1|H'|1\rangle)$$

$$+C_2(t)e^{-iE_2t/\hbar}(\langle 1|H_0|2\rangle+\langle 1|H'|2\rangle)$$

$$=E_1C_1(t)e^{-iE_1t/\hbar}+C_2(t)\hbar\omega_0e^{-iE_2t/\hbar} \tag{10.17.10}$$

由此可导出

$$i\hbar\dot{C}_1(t)=e^{-\omega_{21}t}C_2(t)\hbar\omega_0 \tag{10.17.11}$$

其中 $\omega_{21}=\frac{1}{\hbar}(E_2-E_1)$. 同样将(10.17.9)用$\langle 2|$左乘,我们得到

$$i\hbar\dot{C}_2(\psi)=C_1(t)e^{i\omega_{21}t}\hbar\omega_0-C_2(t)\hbar\omega_{21} \tag{10.17.12}$$

(10.17.11)和(10.17.12)构成一个系数 $C_1(t)$和 $C_2(t)$满足的常微分方程组

$$\begin{cases}i\hbar\dot{C}_1(t)=e^{-i\omega_{21}t}C_2(t)\hbar\omega_0\\ i\hbar\dot{C}_2(t)=C_1(t)e^{i\omega_{21}t}\hbar\omega_0-C_2(t)\hbar\omega_{21}\end{cases} \tag{10.17.13}$$

从第一个方程解出 $C_2(t)$并对时间微分

$$\dot{C}_2(t)=\frac{i}{\omega_0}[\ddot{C}_1(t)e^{i\omega_{21}t}+i\omega_{21}\dot{C}_1(t)e^{i\omega_{21}t}] \tag{10.17.14}$$

将这 2 个等式代入第二个方程,后得到

$$\ddot{C}_1(t)+\omega_0^2C_1(t)=0 \tag{10.17.15}$$

利用初始条件 $C_1(t=0)=0$,(10.17.15)给出 $C_1(t)=\cos(\omega_0t)$. 由此我们可以算出系数 $C_2(t)$, $C_2(t)=-i\sin(\omega_0t)e^{i\omega_{21}t}$. 最后得到

$$|\psi(t)\rangle=e^{-iE_1t/\hbar}[\cos(\omega_0t)|1\rangle-i\sin(\omega_0t)|2\rangle] \tag{10.17.16}$$

与法 1 相同.

(c) 系统处于状态$|2\rangle$中的概率为

$$P_{|1\rangle\to|2\rangle}=|\langle 2|\psi(t)\rangle|^2=\sin^2(\omega_0t) \tag{10.17.17}$$

(a)中的近似方法在 $\sin^2(\omega_0 t)\ll 1$* 时成立．在 $P=1$** 即 $\omega_0 T=\pm\frac{\pi}{2}+\pi k$，$k\in N$ 时系统处于 $|2\rangle$ 态．此时 $T=\pm\frac{\pi}{2\omega_0}+\frac{\pi k}{\omega_0}$，$k\in N$.

## 补 充 习 题

**10.18** 应用升降算符重解 10.3.

**10.19** 考虑一个在线性微扰下的一维谐振子．对于基态能量，计算其前 2 阶微扰修正．(首先无量纲化).

**答案** $E(\lambda)=1-\lambda^2/4$.

**10.20** 在约化质量为 $m$，弹性常数为 $k$ 的谐振子上加上一个小微扰 $W=ax^4$．计算一阶能级修正和最低一阶的波函数修正.

**答案** $E_n^{(1)}=\frac{3a}{2\alpha^2}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)$；$\phi_0=\phi_0^{(0)}-\frac{3\sqrt{2}a}{4\hbar\omega\alpha^2}\phi_2^{(0)}+\cdots$.

**10.21** 考虑由下式给出的哈密顿算符 $H=H_0+V(x,y)$，其中 $H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2)$*** 而 $V(x,y)=\lambda m\omega^2 xy$ 为微扰．(a) 构造系统严格的基态．(b)利用二阶微扰论计算基态能量的二阶修正.

**答案** (a)
$$\psi_0(x,y)=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}(1-\lambda^2)^{1/8}\exp\left(-\frac{m\omega(\sqrt{1-\lambda}+\sqrt{1+\lambda})x^2}{4\hbar}\right)$$
$$\times\exp\left(-\frac{m\omega(\sqrt{1-\lambda}+\sqrt{1+\lambda})y^2}{4\hbar}\right)\exp\left(\frac{m\omega(\sqrt{1-\lambda}-\sqrt{1+\lambda})xy}{2\hbar}\right)$$

(b) $E_0^{(2)}=-\frac{\lambda^2\hbar\omega}{8}$，而严格解为 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega(\sqrt{1-\lambda}+\sqrt{1+\lambda})\cong\hbar\omega-\frac{\lambda^2\hbar\omega}{8}+\cdots$.

**10.22** 一个质量为 $m$，电荷为 $q$ 的粒子在一维谐振子势场中运动，同时加上一个弱电场 $\varepsilon$．(a) 计算能级和本征态最低阶的非零修正；(b) 计算系统的电偶极矩；(c) 严格求解((a)和(b)并与近似解相比较.

**答案** (a) $\Delta E=-\frac{(\varepsilon e)^2}{2m\omega^2}$；$|\psi_n\rangle=|\phi_n\rangle-\varepsilon e\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega^3}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}|\phi_{n-1}\rangle-\sqrt{\frac{n+1}{2}}|\phi_{n+1}\rangle\right]$；(b) $P=\frac{\varepsilon e^2}{2m\omega^2}$.

**10.23** 一个电偶极矩为 $\boldsymbol{d}$，转动惯量为 $I$ 的平面转子在转动平面内的均匀电场中运动．计算转子能级的最低阶非零修正．假定微扰由电场 $\boldsymbol{E}$ 给出．提示：微扰 $W=-\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{E}$.

**答案** $E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(2)}=\frac{\hbar^2n^2}{2I}+\frac{I(Ed)^2}{\hbar^2(4m^2-1)}$.

**10.24** 给定哈密顿算符

$$H=\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_0^2(x_1^2+x_2^2)+V_{rel}(x_1-x_2)\tag{10.24.1}$$

其中：$V_{rel}(x_1-x_2)=\frac{1}{4}m\omega_1^2(x_1-x_2)^2$．(a) 构造系统的严格能级．(b)取 $W=V_{rel}(x_1-x_2)$，利用二阶微扰论计算基态能量.

**答案** (a) $E_{Nn}=(N+1/2)\hbar\omega_0+(n+1/2)\hbar\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}$ $(N,\ n=0,\ 1,\ \cdots)$

$E_{00}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}\cong\hbar\omega_0+\frac{\hbar\omega_1^2}{4\omega_0}-\frac{\hbar}{16}\frac{\omega_1^4}{\omega_0^3}+\cdots$. (b) $E_0=\hbar\omega_0+\frac{\hbar\omega_1^2}{4\omega_0}-\frac{\hbar}{16}\frac{\omega_1^4}{\omega_0^3}$

**10.25** 将电子之间的相互作用看成微扰，在一阶近似下计算双电子原子或离子在核 $Ze$ 中的基态能量.

**答案** $E\approx E^{(0)}+E^{(1)}=-\left(Z^2-\frac{5}{8}Z\right)\frac{me^4}{\hbar^2}$.

---

* 原文为"$\omega_0 t\ll 1$"．错误！现改正——译者注.

** 原文误为"$P=0$"——译者注.

*** 原著中的零阶近似哈密顿算符少动能项．现根据题意改正——译者注.

**10.26** 考虑一个由 3 个正交的未微扰态构成的量子系统. 加上微扰项之后的哈密顿算符由下面的矩阵给出：

$$H=\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix} \tag{10.26.1}$$

其中 $E_2<E_1$. (a) 利用二阶非简并微扰论计算非简并能级的微扰；(b)将矩阵对角化得出严格的能级和本征态；(c)利用简并态微扰论计算简并能级的微扰. *

**答案**　因原题有错，答案已无用. 删去.

**10.27** 如图 10-6 所示是一个 3 原子线性分子.

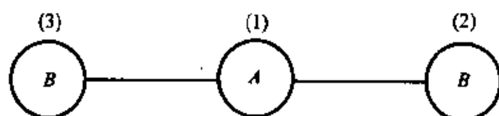



图 10-6

电子在原子 $A$ 附近时能量为 $E_1$；在原子 $B$ 附近时能量为 $E_2$；$E_1<E_2$. (a)在零阶近似下假定电子在原子间不发生跃迁，给出哈密顿算符 $H_0$. (b) 加上一个小微扰使得电子能够在不同种的原子间跃迁. 与这个跃迁相对应的能量为 $a$，其中 $a\ll E_1$. 计算能级和能量本征态的一阶修正. (将 $E_1$ 的修正算到 2 阶)(c)假定 $t=0$ 时，电子处于原子 $B$ 附近. 利用(b)中的近似结果，计算 $t>0$ 时电子处于原子 $A$ 附近的概率. (d)构造电子的严格本征能量. (e)假定电子能在原子 $B$ 间运动，对应的跃迁能量为 $b$, $b\ll a$. ；利用微扰论，在未微扰哈密顿算符取为 $H_0+W$ 时系统的能级和能量本征态，其中 $W$ 是(b)中引入的相互作用.

**答案**　(a) $H_0=\begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix}$；(b) $W=\begin{pmatrix} 0 & a & a \\ a & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 \end{pmatrix}$；

$$E_1=E_1^{(0)}+\langle 1|W|1\rangle+2\frac{|\langle 2|W|1\rangle|^2}{E_2-E_1}=E_1^{(0)}+\frac{2a^2}{E_2-E_1};$$

$$|\psi_1\rangle=|1\rangle-\frac{\langle 2|W|1\rangle}{E_2-E_1}|2\rangle-\frac{\langle 3|W|1\rangle}{E_3-E_1}|3\rangle=|1\rangle-\frac{a}{E_2-E_1}(|2\rangle+|3\rangle),$$

$$|\psi_1\rangle=\begin{pmatrix} 1 \\ -\dfrac{a}{E_2-E_1} \\ -\dfrac{a}{E_2-E_1} \end{pmatrix}$$

态 $|\psi_2\rangle$ 和 $|\psi_3\rangle$ 是简并的. 其一阶修正为 0.

(c) $P_{|2\rangle\to|1\rangle}=0$；(d) $E_1=E_3=\frac{1}{2}\left(E_1^{(0)}+E_2^{(0)}\pm\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2-8a^2}\right)$, $E_2=E_2^{(0)}$；

(e) $\tilde{E}_2=E_2-b$,　$\tilde{E}_1=\tilde{E}_3=\frac{1}{2}\left(E_1+E_2+b\pm\sqrt{(E_1-E_2-b)^2-2a^2}\right)$.

---

* 此处原文为"Use a secondorder nondegenerate pertubation to find the pertubated eigenvalues. Diagonalize the matrix and find the exact eigenvalues. Repeat using a second-order degenerate pertubationg. Explain the inconsistencies arising from the different approaches.". 这道题目出得莫名其妙！首先，2 阶简并态微扰论原著并未涉及；其次，在微扰论中简并能级和非简并能级必须分开处理！可见作者的基本概念有问题. 现根据原来的思路重新出题——译者注.

**10.28** 在类氢原子的核不是点电荷的情况下计算其基态的一阶修正. 假定核是一个半径为 $R$ 的均匀带 $Ze$ 电荷的球体. 提示:均匀带电球体产生的静电势为

$$V(r)=\begin{cases}-\dfrac{Ze^2}{R}\left(\dfrac{3}{2}-\dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R^2}\right), & 0\leqslant r\leqslant R\\ -\dfrac{Ze^2}{r}, & r\geqslant R\end{cases} \tag{10.28.1}$$

**答案**　$E_0\approx E_0^{(0)}+E_0^{(1)}=E_0^{(0)}\left[1-\frac{4}{5}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right]$.

**10.29** 一个谐振子由下式描述

$$H=\frac{1}{2m}p_x^2+\frac{1}{2}m\omega^2(t)x^2 \tag{10.29.1}$$

其中 $\omega(t)=\omega_0+\cos(at)\delta\omega$, $\delta\omega\ll\omega_0$($a$ 为常数). 假定在 $t=0$ 时系统处于基态. 利用微扰论计算基态到末态 $f$ 的跃迁概率.

计算中可应用公式$\langle n|x^2|0\rangle=m\hbar\omega/\sqrt{2}\delta_{n,2}$.

**答案**　$P_{0\to f}(t)\approx\frac{(\delta\omega)^2}{8\omega_0^2}\left[\frac{\sin(\omega_{fi}-a)t/2}{(\omega_{fi}-a)/2}\right](\sqrt{2}\delta_{a,2\omega_0}+\delta_{a,0})$.

# 第十一章 量子力学问题的解法——部分B

## 11.1 变分法

在第十章中发展的微扰论并非量子力学惟一的计算方法. 在本节中我们将给出“保守”系统的另外一种处理方法. 考虑一个哈密顿算符 $H$ 不显含时间的量子系统. 为了简化讨论,我们假定 $H$ 具有非简并的离散谱

$$(H \mid \phi_n\rangle = E_n \mid \phi_n\rangle), \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{11.1}$$

定义 $E_0$ 为 $H$ 最小的本征值(也就是系统最低的能级). 任意状态 $|\psi\rangle$ 都能写成下式:

$$\mid \psi\rangle = \sum_n C_n \mid \phi_n\rangle \tag{11.2}$$

由此

$$\langle \psi \mid H \mid \psi\rangle = \sum_n \mid C_n \mid^2 E_n \geqslant E_0 \sum_n \mid C_n \mid^2 \tag{11.3}$$

另一方面

$$\langle \psi \mid \psi\rangle = \sum_n \mid C_n \mid^2 \tag{11.4}$$

最后我们得到:对于任意右矢 $|\psi\rangle$

$$\langle H\rangle = \frac{\langle \psi \mid H \mid \psi\rangle}{\langle \psi \mid \psi\rangle} \geqslant E_0 \tag{11.5}$$

方程(11.5)是变分法的基础. 选择一组右矢 $|\psi(\{\alpha\})\rangle$——称为试探右矢. 计算 $H$ 在状态 $|\psi(\{\alpha\})\rangle$ 中的平均值,并将 $\langle H\rangle(\{\alpha\})$ 对 $\{\alpha\}$ 求最小值. * 这个最小值就是近似的基态能量.

方程(11.5)是一个更一般的结果——Ritz 定理——的特殊情况:哈密顿算符 $H$ 的离散谱对应的本征函数是 $H$ 的平均值作为泛函的驻点(见问题 11.1).

变分法也可以用来处理非基态的能级. **

## 11.2 半经典近似(WKB 近似)

除了在前面已经介绍过的微扰论和变分法之外,还有一种适合于求解一维薛定谔方程的

---

* 原文为“minimized”. 不确切,现更正——译者注.

** 这里的原文是:“The variational method can therefore be generalized and provide estimations for other energy level besides the ground state If the function $\langle H\rangle(\alpha)$ obtained from the trail kets $(|\psi(\alpha)\rangle)$ has several extrama, they give approximate values of some of its energies $E_n$.”第一个句号后的部分的直译即是:“如果用试探波函数 $|\psi(\alpha)\rangle$ 算出的 $\langle H\rangle(\alpha)$ 有几个极值,它们也对应于某些能级 $E_n$ 的近似值”. $\langle H\rangle$ 是 $|\psi\rangle'$ 的一个泛函, $|\psi\rangle$ 的全体张成状态空间——大多数情况下都是无限维的. 严格来说,我们应该通过在整个状态空间中求泛函极值的方法来给出基态能量——这个方法本质上就相当于求解定态薛定谔方程! 变分法的精髓在于用状态空间里的一个与参数集合 $\{\alpha\}$ 一一对应(严格说来应该是微分同胚)的集合 $\Omega$ 来代替整个状态空间,用泛函 $\langle H\rangle$ 在 $\Omega$ 上的最小值——这个最小值用多变量微分学的方法即可求出——来代替泛函 $\langle H\rangle$ 在整个状态空间中的最小值. (这当然是一个近似!)而泛函 $\langle H\rangle$ 在 $\Omega$ 上的最小值与其说是接近于真正的基态,毋宁说是接近于某一个状态——并不一定非要是基态,而泛函 $\langle H\rangle$ 在 $\Omega$ 上其他的极值点就更找不到与之对应的状态了,这对于我们的计算毫无帮助. 将变分法的形式改变一下之后也可以用来处理激发态,不过是比较麻烦的,在具体计算时需要仔细地研究激发态的诸如对称性之类的细致结构. 我们推荐读者去参考量子力学的标准教科书——译者注.

方法．这种方法称为半经典近似法或 WKB 近似(由 Wentzel，Kramers 和 Brillouin 三人得名)．在三维球对称势场情况下，径向微分方程能够通过分离变量得到，此时 WKB 方法也可应用．

WKB 方法将待求的波函数展开成 $\hbar$ 的幂级数并忽略 $\hbar^2$ 以上的项．这相当于把薛定谔方程用其经典极限 $\hbar\to 0$ 代替．这个方法甚至可以应用到经典图像已经失效的区域里去(经典粒子不可能到达的区域)．

考虑一维薛定谔方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi(x)=0 \tag{11.6}$$

我们只考虑定态，并将其波函数写成 $\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}u(x)}$ 引入缩写记号

$$\begin{cases} k(x)=\dfrac{1}{\hbar}\sqrt{2m[E-V(x)]}, & E>V(x) \\ k(x)=(-\mathrm{i})\chi(x)=\dfrac{-\mathrm{i}}{\hbar}\sqrt{2m[V(x)-E]}, & E<V(x) \end{cases} \tag{11.7}$$

将 $\psi(x)$ 代入(11.7)，得到 $u(x)$ 满足的方程

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}-\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)^2+[k(x)]^2=0 \tag{11.8}$$

在 WKB 近似中，我们将 $u(x)$ 展开成 $\hbar$ 的幂级数

$$u(x)=u_0+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}u_1+\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2u_2+\cdots \tag{11.9}$$

我们只研究 $u_0$ 和 $u_1$．给出 WKB 近似中的近似波函数

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{|k(x)|}}\exp\left\{\mathrm{i}\int^x k(x')\mathrm{d}x'\right\}+\frac{C_2}{\sqrt{|k(x)|}}\exp\left\{-\mathrm{i}\int^x k(x')\mathrm{d}x'\right\} \tag{11.10}$$

区域 $E>V(x)$ 称为经典允许区域；而区域 $E<V(x)$ 称为经典禁戒区域．两种区域的边界点称为转向点(此处 $E=V(x)$)．

**WKB 近似的适用条件**　WKB 近似的适用条件为

$$\frac{1}{2}|k'(x)|\ll|k^2(x)| \tag{11.11}$$

这个条件有几种等价的形式．利用德布罗意波长 $\lambda=2\pi/k$，(11.11)能够写成

$$\frac{\lambda}{4\pi}\left|\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}x}\right|\ll k \tag{11.12}$$

在转向点附近 $k(x_0)=0$，我们有

$$k\approx\left.\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}x}\right|_{x_0}(x-x_0) \tag{11.13}$$

在转向点之间的距离满足下列条件时半经典近似成立：

$$|x-x_0|\gg\frac{\lambda}{4\pi} \tag{11.14}$$

**联接公式**　考虑转向点附近 WKB 近似波函数的行为．假定 WKB 近似只有在非常靠近转向点的区域才会失效．转向点两边的 WKB 近似波函数的联接与经典允许区域是在转向点的左边(图 11-1)还是右边(图 11-2)有关．

对于第一种情况，我们有 $x>b$

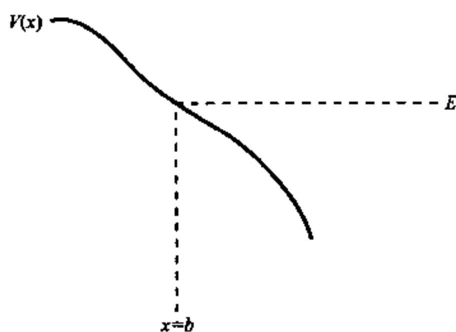



图 11-1

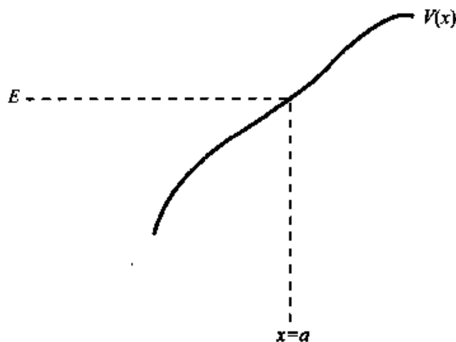



图 11-2

$$\psi_1(x)=\frac{A_1}{\sqrt{k}}\cos\left(\int_b^x k(x')\mathrm{d}x'-B_1\pi\right) \tag{11.15}$$

第二种情况对应于 $x<a$

$$\psi_2(x)=\frac{A_2}{k}\cos\left(\int_x^a k(x')\mathrm{d}x'-B_2\pi\right) \tag{11.16}$$

**在束缚态问题中的应用**　WKB 近似可以用来导出束缚态能级满足的方程．在势阱的两端应用联接公式，我们可得到(见题 11.13)

$$\int_a^b k(x)\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,\qquad n=0,1,2,\cdots \tag{11.17}$$

也可写成

$$\oint p(x)\mathrm{d}x=2\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad n=0,1,2,\cdots \tag{11.18}$$

此式称为 Bohr-Sommerfeld 量子化条件．

**在势垒穿透问题中的应用**　考虑一个在 $x=a$ 和 $x=b$ 之间的势垒．在 WKB 近似下一个能量为 $E$ 的粒子在势垒上的穿透系数由下式给出：

$$T\approx\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2m[V(x)-E]}\mathrm{d}x\right] \tag{11.19}$$

## 例 题 解 答

**11.1**　定义$\langle H\rangle$为$\langle H\rangle=\dfrac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$，其中$|\psi\rangle$为态空间的任意右矢．证明$|\psi\rangle$是$\langle H\rangle$的驻点($\delta\langle H\rangle=0$)的充要条件是$|\psi\rangle$是 $H$ 对应于本征值$\langle H\rangle$的本征向量．

**证明**　$\langle H\rangle=\langle\psi|H|\psi\rangle/\langle\psi|\psi\rangle$写成$\langle\psi|\psi\rangle\langle H\rangle=\langle\psi|H|\psi\rangle$．将两端变分后得到

$$(\langle\delta\psi|\psi\rangle+\langle\psi|\delta\psi\rangle)\langle H\rangle+\langle\psi|\psi\rangle\delta\langle H\rangle=\langle\delta\psi|H|\psi\rangle+\langle\psi|H|\delta\psi\rangle \tag{11.1.1}$$

由于$\langle H\rangle$是数值，将(11.1.1)写为

$$\langle\psi|\psi\rangle\delta\langle H\rangle=\langle\delta\psi|(H-\langle H\rangle)|\psi\rangle+\langle\psi|(H-\langle H\rangle)|\delta\psi\rangle \tag{11.1.2}$$

定义$|\phi\rangle=(H-\langle H\rangle)|\psi\rangle$．(11.1.2)式可写为简单形式

$$\langle\psi|\psi\rangle\delta\langle H\rangle=\langle\delta\psi|\phi\rangle+\langle\phi|\delta\psi\rangle \tag{11.1.3}$$

方程(11.1.3)对于任意的$|\delta\psi\rangle$和$\langle\delta\psi|$成立. 注意到$|\delta\psi\rangle$和$\langle\delta\psi|$作为波函数来说其实部和虚部是独立变化的(状态空间是复的),因而$|\delta\psi\rangle$和$\langle\delta\psi|$也是独立的变分.

若$|\psi\rangle$是$\langle H\rangle$的驻点,此时$\delta\langle H\rangle=0$,我们立即可以得到$|\phi\rangle=0$,因此$H|\psi\rangle=\langle H\rangle|\psi\rangle$和$\langle\psi|H=\langle H\rangle\langle\psi|$. 这说明$|\psi\rangle$是$H$对应于本征值$\langle H\rangle$的本征向量. 反过来,如果$H|\psi\rangle=\langle H\rangle|\psi\rangle$满足,我们也可以得到$\delta\langle H\rangle=0$,这说明$|\psi\rangle$是$\langle H\rangle$的驻点.

**11.2** 考虑一个一维谐振子

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{11.2.1}$$

(a)对于单参数波函数族$\psi_\alpha(x)=\mathrm{e}^{-\alpha x^2}(\alpha>0)$,找到使$\langle H\rangle$取最小值的波函数. 这个最小值是多大? (b)对于另一个单参数波函数族$\psi_\beta(x)=x\mathrm{e}^{-\beta x^2}$,找出使$\langle H\rangle$取最小值的波函数并计算这个最小值;(c)对于如下的波函数族进行上述计算.

$$\psi_\gamma(x)=\frac{1}{x^2+\gamma}\qquad(\gamma>0) \tag{11.2.2}$$

**解** (a) 计算$\langle H\rangle$

$$\langle H\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_\alpha^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi_\alpha(x)\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_\alpha^*(x)\psi_\alpha(x)\mathrm{d}x}=\frac{\hbar^2}{2m}\alpha+\frac{1}{8}m\omega^2\frac{1}{\alpha} \tag{11.2.3}$$

将$\langle H\rangle$对$\alpha$微分

$$\frac{\mathrm{d}\langle H\rangle}{\mathrm{d}\alpha}=\frac{\hbar^2}{2m}-\frac{1}{8}m\omega^2\frac{1}{\alpha^2} \tag{11.2.4}$$

利用驻点条件$\left.\frac{\mathrm{d}\langle H\rangle}{\mathrm{d}\alpha}\right|_{\alpha=\alpha_0}=0$可得到$\frac{\hbar^2}{2m}-\frac{1}{8}m\omega^2\frac{1}{\alpha_0^2}=0$, $\alpha_0=\frac{m\omega}{2\hbar}$;在此$\alpha_0$给出$\langle H\rangle$的最小值(容易验证). 使得$\langle H\rangle$最小化的波函数为$\psi_{\alpha_0}(x)=\mathrm{e}^{-m\omega x^2/2\hbar}$

$$\langle H\rangle_{\min}=\frac{\hbar^2}{2m}\alpha_0+\frac{1}{8}m\omega^2\frac{1}{\alpha_0}=\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{11.2.5}$$

这个$\langle H\rangle_{\min}$与一维谐振子$n=0$的能级相同. 这是由于我们研究的这族波函数中包括了谐振子的基态波函数的缘故.

(b) 利用与(a)中同样的方法得到

$$\langle H\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_\beta^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi_\beta(x)\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_\beta^*(x)\psi_\beta(x)\mathrm{d}x}=\frac{3\hbar^2}{2m}\beta+\frac{3m\omega^2}{8}\frac{1}{\beta} \tag{11.2.6}$$

和

$$\frac{\mathrm{d}\langle H\rangle}{\mathrm{d}\beta}=\frac{3\hbar^2}{2m}-\frac{3m\omega^2}{8}\frac{1}{\beta^2}=0 \tag{11.2.7}$$

我们得出$\beta_0=\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}$, $\psi_{\beta_0}(x)=x\mathrm{e}^{-m\omega x^2/2\hbar}$;这样$\langle H\rangle_{\min}=\frac{3}{2}\hbar\omega$. 这个$\langle H\rangle_{\min}$与一维谐振子$n=1$的能级相同. (试着解释这一结果.)

(c) 与前面的处理方法相同,我们得到

$$\langle H\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_\gamma^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi_\gamma(x)\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}\psi_\gamma^*(x)\psi_\gamma(x)\mathrm{d}x}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\gamma}+\frac{1}{2}m\omega^2\gamma \tag{11.2.8}$$

和

$$\psi_{\gamma_0}(x)=\frac{1}{x^2+\hbar^2/\sqrt{2}m\omega},\quad \gamma_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{m\omega} \tag{11.2.9}$$

这里$\langle H\rangle_{\min}=\sqrt{2}\frac{1}{2}\hbar\omega$. 它等于基态能量的$\sqrt{2}$倍.

**11.3** (a) 利用变分法估计氢原子的基态能量. 试探波函数取为球对称函数族 $\phi_\alpha(r)$,它与 $r$ 的依赖关系如下:

$$\phi_\alpha(r)=\begin{cases}C\left(1-\dfrac{r}{\alpha}\right), & r\leqslant\alpha\\ 0, & r>\alpha\end{cases}\tag{11.3.1}$$

其中 $C$ 是归一化常数,$\alpha$ 是变分参数.

(b) 找出对应于能量均值的最小值的 $\alpha$,并与玻尔半径进行比较.

**解** (a) 首先计算归一化常数. 我们有 $C^2=15/\pi\alpha^3$. 动能部分的积分$\langle E_k\rangle$为

$$\langle E_k\rangle=-\frac{2\pi\hbar^2}{2m}\int_0^\alpha r^2\phi_\alpha(r)\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2(r\phi_\alpha)}{\mathrm{d}r^2}\right]\mathrm{d}r\tag{11.3.2}$$

分部积分

$$\langle E_k\rangle=-\frac{\pi\hbar^2}{m}\left(r\phi_\alpha(r)\frac{\mathrm{d}(r\phi_\alpha)}{\mathrm{d}r}\right)\Bigg|_0^\alpha+\frac{\pi\hbar^2}{m}\int_0^\alpha\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r\phi_\alpha(r))\right]^2\mathrm{d}r\tag{11.3.3}$$

由于$(r\phi_\alpha(r))|_{r=0}=(r\phi_\alpha(r))|_{r=\alpha}=0$,第一项为0. 我们有

$$\langle E_k\rangle=\frac{\pi\hbar^2}{m}\int_0^\alpha\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r\phi_\alpha(r))\right]^2\mathrm{d}r=\frac{15\hbar^2}{2m}\alpha^{-3}\int_0^\alpha\left(1-\frac{2r}{\alpha}\right)^2\mathrm{d}r=\frac{15\hbar^2}{m}\alpha^{-3}\left[\alpha-2\alpha+\frac{4}{3}\alpha\right]=\frac{5\hbar^2}{m}\frac{1}{\alpha^2}\tag{11.3.4}$$

势能部分的积分$\langle V\rangle$为

$$\begin{aligned}\langle V\rangle&=2\pi\int_0^\infty r^2\phi_\alpha(r)V(r)\phi_\alpha(r)\mathrm{d}r=2\pi ke^2\int_0^\alpha r\,|\,\phi_\alpha(r)\,|^2\mathrm{d}r=-30ke^2\int_0^\alpha\left(r-\frac{2r^2}{\alpha}+\frac{r^3}{\alpha^2}\right)\mathrm{d}r\\&=-\frac{15ke^2}{6}\frac{1}{\alpha}\end{aligned}\tag{11.3.5}$$

总能量作为 $\alpha$ 的函数为

$$\langle E(\alpha)\rangle=\langle E_k\rangle+\langle V\rangle=5\left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{\alpha^2}-\frac{ke^2}{2}\frac{1}{\alpha}\right)\tag{11.3.6}$$

(b) 驻点条件 $\mathrm{d}\langle E\rangle/\mathrm{d}\alpha=0$ 给出

$$\frac{2\hbar^2}{m}\alpha_0^{-3}=\frac{1}{2}ke^2\alpha_0^{-2}\Rightarrow\alpha_0=\frac{4\hbar^2}{kme^2}\tag{11.3.7}$$

注意玻尔半径 $a_0=\hbar^2/kme^2$,我们有 $\alpha_0=4a_0$.

**11.4** (a) 写出氦原子的薛定谔方程. 在忽略两个电子之间的相互作用时基态的解是什么?

(b) 假定一个电子对于另一个电子的作用被等同于对核电荷的屏蔽效应,并取屏蔽后的电荷 $Z-\sigma$ 中的$\sigma$ 为变分参数. 采用变分法计算$\langle H\rangle$和屏蔽后的等效电荷.

**解** (a) 从氦原子的哈密顿算符出发

$$H=\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}-Ze^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_{12}}\tag{11.4.1}$$

其中 $r_{12}=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$. 我们将哈密顿算符写到 $e=\hbar=m=1$ 的单位制下. 此时薛定谔方程为

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{1}{2}\nabla_2^2-Z\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}}\right]\psi(r_1,r_2)=E\psi(r_1,r_2)\tag{11.4.2}$$

在忽略 $e^2/r_{12}$时,方程的解能够分离变量

$$\psi_0(r_1,r_2)=u_1(r_1)u_2(r_2)=\frac{Z^{3/2}}{\pi^{1/2}}\mathrm{e}^{-Zr_1}\frac{Z^{3/2}}{\pi^{1/2}}\mathrm{e}^{-Zr_2}=\frac{Z^3}{\pi}\mathrm{e}^{-Z(r_1+r_2)}\tag{11.4.3}$$

注意：$\frac{Z^{3/2}}{\pi^{1/2}}e^{-Zr_1}$ 和 $\frac{Z^{3/2}}{\pi^{1/2}}e^{-Zr_2}$ 分别是类氢原子的基态波函数.

(b) 考虑另外一个电子的存在,影响每个电子的核的有效电荷会有所下降. 定义 $Z_{eff}=Z-\sigma$,其中 $\sigma$ 是屏蔽电荷. 选取试探波函数族为

$$\psi_\sigma(r_1, r_2)=\frac{(Z-\sigma)^3}{\pi}\exp[-(Z-\sigma)(r_1+r_2)] \tag{11.4.4}$$

由于

$$H\psi_\sigma=\left[-(Z-\sigma)^2-\frac{\sigma}{r_1}-\frac{\sigma}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}\right]\psi_\sigma \tag{11.4.5}$$

我们有

$$\begin{aligned}\langle H\rangle&=\frac{\iint\psi_\sigma^* H\psi_\sigma d^3r_1d^3r_2}{\iint\psi_\sigma^*\psi_\sigma d^3r_1d^3r_2}=\iint\left[-(Z-\sigma)^2-\frac{\sigma}{r_1}-\frac{\sigma}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}\right]\psi_\sigma^2d^3r_1d^3r_2\\&=-(Z-\sigma)^2-2\frac{(Z-\sigma)^3}{\pi}\int_0^\infty\frac{\sigma}{r}4\pi r^2e^{-(Z-\sigma)r}dr+\frac{(Z-\sigma)^6}{\pi^2}\iint\frac{e^{-2(Z-\sigma)(r_1+r_2)}}{r_{12}}d^3r_1d^3r_2\end{aligned} \tag{11.4.6}$$

或

$$\langle H\rangle=-(Z-\sigma)^2-\frac{2(Z-\sigma)^3}{\pi}\frac{\pi\sigma}{(Z-\sigma)^2}+\frac{(Z-\sigma)^6}{\pi^2}\iint\frac{e^{-2(Z-\sigma)(r_1+r_2)}}{r_{12}}d^3r_1d^3r_2 \tag{11.4.7}$$

为计算最后一个积分,把 $1/r_{12}$ 用勒让德多项式展开(见数学附录)

$$\frac{1}{r_{12}}=\begin{cases}\frac{1}{r_1}\sum_{n=0}^\infty\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^nP_n(\cos\theta), & 0\leqslant r_1\leqslant r_2\\ \frac{1}{r_1}\sum_{n=0}^\infty\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^nP_n(\cos\theta), & r_2\leqslant r_1<\infty\end{cases} \tag{11.4.8}$$

对积分有贡献的只有 $n=0$ 的一项(由于被积函数的对称性),由此

$$\begin{aligned}\iint\frac{e^{-2(Z-\sigma)(r_1+r_2)}}{r_{12}}d^3r_1d^3r_2&=\int e^{-2(Z-\sigma)r_2}\left[4\pi\left(\frac{1}{r_2}\int_0^{r_2}r_1^2e^{-2(Z-\sigma)r_1}dr_1+\int_{r_2}^\infty r_1e^{-2(Z-\sigma)r_2}dr_1\right)\right]d^3r_2\\&=\frac{5\pi^2}{8(Z-\sigma)^5}\end{aligned} \tag{11.4.9}$$

$\langle H\rangle$ 的表达式为

$$\langle H\rangle=-(Z-\sigma)^2-2(Z-\sigma)\sigma+\frac{5}{8}(Z-\sigma) \tag{11.4.10}$$

利用关系 $\frac{d\langle H\rangle}{d\sigma}=0$ 我们得到 $\sigma=\frac{5}{16}$ 和 $Z_{eff}=\frac{27}{16}e$.

**11.5** 对于一个一维吸引势 $V(x)$, $V(x)<0$ 对于所有的 $x$ 成立. 利用变分法证明这种势至少存在一个能量不大于 0 的本征态. *

**解答** 对于在这个势场中运动的粒子,我们选择如下的试探波函数族:

$$\psi=\sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}}\exp(-ax^2) \tag{11.5.1}$$

这个函数是归一化的. 对于基态能量[注:假定能谱有下界. ],我们有

* 本题原题的最后一句是"Using the variational principle show that such a potential has at least one bound state."而题解中的结论只能证明这种势至少存在一个能量不大于 0 的状态,却不能说明 $V(x)$ 这个状态一定是束缚态! 大概作者错误地认为能量小于 0 的状态都是束缚态吧. 现根据实际结果重新出题. 关于这类吸引势是否存在束缚态的问题比较复杂,读者可以参考其他标准教科书中关于一维定态问题的讨论 ——译者注.

$$E_0 \leqslant \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi dx \tag{11.5.2}$$

由于 $V(x)<0$,对于所有的 $x$ 成立,我们需要验证 $E_0<0$,将试探波函数代入,我们有

$$\begin{aligned}
E_0 &\leqslant \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\exp(-ax^2)dx \\
&= \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\exp(-ax^2)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)(\exp(-ax^2)) + V(x)\exp(-2ax^2)\right]dx \\
&= \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{a\hbar^2}{2m}[1-2ax^2]\exp(-2ax^2) + V(x)\exp(-2ax^2)\right]dx \\
&= \frac{a\hbar^2}{2m} - \frac{a\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} 2ax^2\exp(-2ax^2)dx + \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} V(x)\exp(-2ax^2)dx \quad (11.5.3)
\end{aligned}$$

定义

$$E'_0 = \frac{a\hbar^2}{2m} + \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} V(x)\exp(-2ax^2)dx \tag{11.5.4}$$

由$\sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} 2ax^2\exp(-2ax^2)dx$ 取正值得知:$E_0<E'_0$. 现在来寻找 $E'_0$ 的最小值

$$\frac{\partial E'_0}{\partial a} = \frac{\hbar^2}{2m} + \sqrt{\frac{1}{2a\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} V(x)\exp(-2ax^2)dx - \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} 2x^2 V(x)\exp(-2ax^2)dx = 0$$

(11.5.5)

结合(11.5.4)和(11.5.5)得到

$$(E'_0)_{\min} = \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-2ax^2)(1+4ax^2)V(x)dx \tag{11.5.6}$$

由于 $\exp(-2ax^2)$和$(1+4ax^2)$都是正函数而 $V(x)<0$ 对于任意 $x$ 成立,我们有$(E'_0)_{\min}<0$,从而 $E_0<0$,我们就证明了题中要求证的结果.

**11.6** 一个粒子在一维位势 $V(x)=\lambda x^4$ 中运动. 利用变分法给出基态能量的近似值,并与严格解 $E_0=1.06\frac{\hbar^2}{2m}k^{1/3}$,其中 $k=2m\lambda/\hbar^2$ 进行比较. 试探波函数族选作 $\psi=(2\alpha/\pi)^{1/4}e^{-\alpha x^2}$.

**解答**　首先,试探波函数已经归一化了,$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx=1$. 哈密顿算符为 $H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\lambda x^4$;这样

$$\langle H\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\lambda x^4\right)\psi(x)dx}{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx} \tag{11.6.1}$$

其分母由归一化条件知其为1. 于是

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\alpha x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\alpha x^2}dx + \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\alpha x^2}\lambda x^4\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\alpha x^2}dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}2\alpha[2\alpha x^2-1]dx + \lambda\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^4dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}4\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^2dx + \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}2\alpha\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}dx + \lambda\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^4dx
\end{aligned}$$

(11.6.2)

第一个积分为

$$I_1 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}4\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^2dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}4\alpha^2\frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = -\frac{\hbar^2\alpha}{2m} \tag{11.6.3}$$

第二个积分为

$$I_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}2\alpha\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}dx = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}2\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = \frac{\hbar^2\alpha}{m} \tag{11.6.4}$$

第三个积分为

$$I_3 = \lambda\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}x^4dx = \lambda\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\frac{3}{4(2\alpha)^2}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = \frac{3\lambda}{16\alpha^2} \tag{11.6.5}$$

将这些积分代入,我们有

$$\langle H\rangle = -\frac{\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{\hbar^2\alpha}{m} + \frac{3\lambda}{16\alpha^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{3}{16}\frac{\lambda}{\alpha^2} \tag{11.6.6}$$

此时$\left(\frac{d\langle H\rangle}{d\alpha}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{3}{8}\frac{\lambda}{\alpha_0^3}$.由$\frac{d\langle H\rangle}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=\alpha_0} = 0$给出$\frac{\hbar^2}{2m} - \frac{3}{8}\frac{\lambda}{\alpha_0^3} = 0 \rightarrow \alpha_0 = \left(\frac{3m\lambda}{4\hbar^2}\right)^{1/3}$. 利用$k = 2m\lambda/\hbar^2$得到$\alpha_0 = (3/8)^{1/3}k^{1/3}$. 将其代入(11.6.6),我们有

$$\langle H\rangle_{min} = \frac{3}{4}3^{1/3}\frac{\hbar^2}{2m}k^{1/3} = 1.082\frac{\hbar^2}{2m}k^{1/3} \tag{11.6.7}$$

与$E_0$的严格解相比,我们看到我们的近似相当成功. 误差只有大约2%.

**11.7** 一个粒子在势场中运动. 假定势场$V(\boldsymbol{r})$满足半经典近似条件,试估计粒子分立能级的个数.

**解答** 相空间中动量满足$0 \leqslant p \leqslant p_{min}$,坐标在体积$dV$中的状态个数为$\frac{4}{3}\pi p_{max}^3\frac{dV}{(2\pi\hbar)^3}$.* 对于固定的$\boldsymbol{r}$,粒子的动量可以假定其满足$E = p^2/2m + V(\boldsymbol{r}) \leqslant 0$. 这样,动量的最大值为$p_{max} = \sqrt{-2mV(\boldsymbol{r})}$,将$p_{min}$代入,我们得到体积$dV$里的状态数

$$dN = \frac{4}{3}\pi[-2mV(\boldsymbol{r})]^{3/2}\frac{dV}{(2\pi\hbar)^3} \tag{11.7.1}$$

这样,离散谱的总个数为

$$N = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}\int[-V(\boldsymbol{r})]^{3/2}d^3r \tag{11.7.2}$$

积分是在$V(\boldsymbol{r})<0$的区域内进行的. 当$V(\boldsymbol{r})$按照$r^{-n}$下降(其中$n>2$)时,这个积分是发散的.

**11.8** (a) 对于吸引 Coulomb 势,给出 WKB 近似适用的条件;(b) 对于玻尔氢原子模型,这个条件对应着什么?

**解答** (a) 将 WKB 近似的适用条件写成

$$|dx| \gg \left|\frac{\hbar dp}{2p^2}\right| \tag{11.8.1}$$

忽略因子 1/2,得到

$$\frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll 1 \tag{11.8.2}$$

利用

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-V)} = -\frac{m}{p}\frac{dV}{dx} = \frac{mF}{p} \tag{11.8.3}$$

其中$F = -\frac{dV}{dx}$是经典力. 将(11.8.3)代入(11.8.2),我们得到

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3} \ll 1 \tag{11.8.4}$$

---

* 严格来说,这个状态数是箱归一化条件下动量本征态的个数. 对于势场中的一维定态问题,系统的定态并不是动量本征态——甚至不是连续谱. 因此用这个状态公式是有问题的——译者注.

对于吸引 Coulomb 场，$F=-\alpha/r^2$，这样我们得到动量的估计

$$p\sim\sqrt{2m\,|V|}\sim\sqrt{\frac{m\alpha}{r}} \tag{11.8.5}$$

(11.8.4)成为$\dfrac{m\hbar(\alpha/r^2)}{m^{3/2}\alpha^{3/2}/r^{3/2}}=\dfrac{\hbar r^{-1/2}}{m^{1/2}\alpha^{1/2}}\ll 1$，最后得到

$$r\gg\hbar^2/m\alpha \tag{11.8.6}$$

(b) 氢原子的玻尔半径为 $a_B=\hbar^2/m\alpha$；条件(11.8.6)成为 $r\gg a_B$. 对于玻尔模型，第 $n$ 个能级上的电子到质子的间距为 $r_n=n^2a_B$，WKB 近似的适用条件为 $n\gg 1$.

**11.9** 运用 WKB 近似给出一维无限深势阱内的束缚态，并与严格解进行比较.

**解答**　设势阱壁在 $x=\pm a$ 处. 在边界上波函数为 0. 从方程(11.15)和(11.16)得到

$$\begin{cases}0=\cos(-B_1\pi)\\0=\cos(-B_2\pi)\end{cases} \tag{11.9.1}$$

可解出特解 $B_1=B_2=1/2$. 利用(11.11)得到

$$\int_{-a}^{+a}k_n(x')\mathrm{d}x'=2ak_n=(n+1)\hbar\pi \tag{11.9.2}$$

这样

$$E_n=\frac{1}{2}\frac{\hbar^2k_n^2}{m}=\frac{\pi^2\hbar^2(n+1)^2}{8ma^2} \tag{11.9.3}$$

严格解为 $E_n=\dfrac{\pi^2\hbar^2n^2}{8ma^2}$.

**11.10** 利用 WKB 近似给出线性谐振子的能级.

**解答**　考虑 Bohr-Sommerfeld 量子化条件

$$\int_a^b p(x)\mathrm{d}x=\hbar\pi(n+1/2)\qquad(n=0,1,2,\cdots) \tag{11.10.1}$$

其中 $p(x)=\sqrt{2m(E-V)}$为谐振子的动量，$E$ 是其能量，$V(x)$是势能. 这是因为$\oint p\mathrm{d}x=2\int_a^b p\mathrm{d}x$ 对于线性谐振子成立，我们可以写下由(11.10.1)给出的 Bohr-Sommerfeld 量子化条件. 对于谐振子，我们有 $V=\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$. $a$ 和$b$ 是由条件$p(a)=p(b)=0$ 或即 $E-V=0$ 和 $E-\dfrac{m\omega^2x^2}{2}=0$ 定义的转向点. 这样我们有

$$a=-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}},\quad b=\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \tag{11.10.2}$$

定义新变量 $z=x\sqrt{\dfrac{m\omega^2}{2E}}$，并得到

$$\int_a^b p(x)\mathrm{d}x=\frac{2E}{\omega}\int_{-1}^{1}\sqrt{1-z^2}\,\mathrm{d}z=\frac{\pi E}{\omega} \tag{11.10.3}$$

与(11.10.1)比较后得到

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{11.10.4}$$

由半经典近似得到的结果正好与严格解相同.

**11.11** 利用半经典近似计算下述势垒的穿透系数：

$$V(x)=\begin{cases}V_0\left(1-\dfrac{x^2}{a^2}\right), & -a\leqslant x\leqslant a\\0, & \text{其余}\end{cases} \tag{11.11.1}$$

见图 11-3.

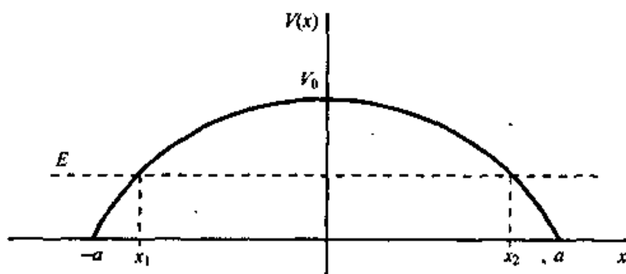



图 11-3

**解答**　设粒子的能量为 $E$,质量为 $m$. 半经典近似下的穿透系数为

$$T \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[V(x)-E]}\mathrm{d}x\right\} \tag{11.11.2}$$

其中 $x_1$ 和 $x_2$ 是由 $V(x)=E$ 定义的转向点

$$x_1=-a\sqrt{1-\frac{E}{V_0}},\quad x_2=+a\sqrt{1-\frac{E}{V_0}} \tag{11.11.3}$$

(11.11.2)变成

$$T \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{-a[1-(E/V_0)]^{1/2}}^{+a[1-(E/V_0)]^{1/2}}\sqrt{2m\left[V_0\left(1-\frac{x^2}{a^2}\right)-E\right]}\mathrm{d}x\right\} \tag{11.11.4}$$

计算积分

$$T \approx \exp\left[-\pi\sqrt{\frac{2m}{V_0}}\frac{a(V_0-E)}{\hbar}\right] \tag{11.11.5}$$

$T$ 的公式的适用条件是(11.11.5)式中的指数很大. 此即

$$\pi\sqrt{\frac{2m}{V_0}}\frac{a(V_0-E)}{\hbar} \gg 1 \tag{11.11.6}$$

**11.12**　极限 $\hbar\to 0$ 给出了量子物理学到经典物理学之间的过渡. 假定波函数能够写成下式 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S(\boldsymbol{r},t)/\hbar}$,且系统处于定态,此时 $S(\boldsymbol{r},t)=\sigma(\boldsymbol{r})-Et$. 导出半经典近似成立的下述条件:(a) $(\nabla\sigma)^2\gg\hbar^2\nabla^2\sigma$ 和 $p^2\gg\hbar|\nabla\cdot\boldsymbol{p}|$;(b) 对于一维运动的特殊情况, $\lambda\gg\left|\frac{\lambda}{2\pi}\right|\left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}x}\right|$,其中 $\lambda$ 是由德布罗意关系 $\lambda=h/p$ 给出的波长;(c) $p^3\gg m\hbar\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right|$.

**解答**　(a) 将波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}$ 代入薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{11.12.1}$$

得到

$$\frac{1}{2m}(\nabla S\cdot\nabla S)-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla^2 S+V(\boldsymbol{r})=-\frac{\partial S}{\partial t} \tag{11.12.2}$$

利用系统处于定态的假定,代入 $S(\boldsymbol{r},t)=\sigma(\boldsymbol{r})-Et$

$$\frac{1}{2m}(\nabla\sigma)^2-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla^2\sigma+V(\boldsymbol{r})=E \tag{11.12.3}$$

要给出量子物理学到经典物理学的过渡,我们必须取极限 $\hbar\to 0$,此时(11.12.3)中的 $-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla^2\sigma$ 项可以忽略,我们得到

$$\frac{1}{2m}(\nabla\sigma)^2 + V(r) = E \tag{11.12.4}$$

这个方程可看成是经典力学中的哈密顿-雅可比方程，其中$\nabla\sigma_0 = \boldsymbol{p}$. 观察(11.12.3)，我们注意到在

$$(\nabla\sigma_0)^2 \gg \hbar\,|\nabla^2\sigma_0| \tag{11.12.5}$$

满足时，(11.12.3)也能过渡到(11.12.4). 于是(11.12.5)式可以当作半经典近似成立的必要条件. 它还能写成下型：

$$p^2 \gg \hbar\,|\nabla\cdot\boldsymbol{p}| \tag{11.12.6}$$

(b) 在一维运动的情况下，$\nabla\cdot\boldsymbol{p} = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}$运用(11.12.6)我们有

$$1 \gg \frac{\hbar\,|\mathrm{d}p/\mathrm{d}x|}{p^2} \tag{11.12.7}$$

将德布罗意关系 $\lambda = h/p$ 对 $x$ 微分，我们得到

$$\left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}x}\right| = \left|\frac{h\mathrm{d}p}{p^2\mathrm{d}x}\right| = \left|\frac{2\pi\hbar\mathrm{d}p}{p^2\mathrm{d}x}\right| \tag{11.12.8}$$

由(11.12.7)，我们有$\left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{2\pi\mathrm{d}x}\right| \ll 1$，这样

$$\lambda \gg \left|\frac{\lambda\mathrm{d}\lambda}{2\pi\mathrm{d}x}\right| \tag{11.12.9}$$

条件(11.12.9)可以做如下的解释：在距离 $\lambda/2\pi$ 上波长的变化必须远远小于波长本身.

(c) 在经典力学中我们有 $p = \sqrt{2m(E-V)}$，由此

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}V}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = -\frac{m}{\sqrt{2m(E-V)}}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = -\frac{m}{p}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} \tag{11.12.10}$$

这样$\left|\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right| = \frac{m}{p}\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right|$. 代入(11.12.7)，最后得到

$$p^3 \gg m\hbar\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right| \tag{11.12.11}$$

**11.13**　利用 WKB 近似导出 Bohr-Sommerfeld 量子化条件. *

**11.14**　应用半经典近似给出粒子在中心力场中运动的径向波函数.

**解**　由中心力场中的粒子理论得知相应波函数的径向部分可写成下型 $R(r) = u(r)/r$；其中 $u(r)$满足方程

$$\frac{\mathrm{d}u^2(r)}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = 0 \tag{11.14.1}$$

将 $u(r)$写成下型：

$$u(r) = C(r)\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{S(r)}{\hbar}\right)\right] \tag{11.14.2}$$

这里 $C(r)$和 $S(r)$是实函数. 将(11.14.2)代入(11.14.1)，得

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}^2C(r)}{\mathrm{d}r^2}\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{S}{\hbar}\right)\right] + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\mathrm{d}C(r)}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}S(r)}{\mathrm{d}r}\exp\left(\frac{\mathrm{i}S}{\hbar}\right) + \frac{\mathrm{d}C(r)}{\mathrm{d}r}\exp\left(\frac{\mathrm{i}S}{\hbar}\right)\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\mathrm{d}S(r)}{\mathrm{d}r}\right)\\&+ C(r)\exp\left(\frac{\mathrm{i}S}{\hbar}\right)\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\mathrm{d}S(r)}{\mathrm{d}r}\right)^2 + C(r)\exp\left(\frac{\mathrm{i}S}{\hbar}\right)\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\mathrm{d}^2S(r)}{\mathrm{d}r^2}\right)\\&+ \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]C(r)\exp\left(\frac{\mathrm{i}S}{\hbar}\right) = 0\end{aligned} \tag{11.14.3}$$

* 原著中本题的解法应用了许多前面没有给出的结果，过于简单. 由于本题的内容在一般的量子力学标准教科书中都有详尽的讨论，而且完整的证明相当长，译者在此将这题的解答删去，建议对本题的解答感兴趣的读者去参照量子力学标准教科书中关于这个问题的讨论 ——译者注.

令(11.14.3)左边的实部和虚部为0,我们有

$$2\frac{dC(r)}{dr}\frac{dS(r)}{dr}+C(r)\frac{d^2S(r)}{dr}=0 \tag{11.14.4}$$

和

$$\left(\frac{dS(r)}{dr}\right)^2-\frac{\hbar^2}{C(r)}\frac{d^2C(r)}{dr^2}=2m[E-V(r)]-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \tag{11.14.5}$$

积分(11.14.4),得到 $C(r)=(\text{const.})\times\left(\frac{dS(r)}{dr}\right)^{-1/2}$,由于 $\hbar^2$ 是小量,我们能够近似求解(11.14.5).

将 $S(r)$和 $C(r)$展开成 $\hbar$ 的级数

$$S(r)=S_0(r)+\hbar S_1(r)+O(\hbar^2)$$

$$C(r)=C_0(r)+\hbar C_1(r)+O(\hbar^2) \tag{11.14.6}$$

代入方程(11.14.4)和(11.14.5)并比较 $\hbar$ 的头两阶幂前面的系数——如要将 $S(r)$和 $C(r)$计算得更加精确一些,可在(11.14.6)中保留 $\hbar$ 的更高阶项,而在 WKB 近似中我们一般都只考虑到 $\hbar$ 阶.我们得到

$$\begin{aligned}&2\frac{dC_0(r)}{dr}\frac{dS_0(r)}{dr}+C_0(r)\frac{d^2S_0(r)}{dr}=0\\&\left(\frac{dS_0(r)}{dr}\right)^2=2m(E-V(r))\end{aligned} \tag{11.14.7}$$

和

$$2\frac{dC_0(r)}{dr}\frac{dS_1(r)}{dr}+2\frac{dC_1(r)}{dr}\frac{dS_0(r)}{dr}+C_0(r)\frac{d^2S_1(r)}{dr}+C_1(r)\frac{d^2S_0(r)}{dr}=0$$

$$2\frac{dS_0(r)}{dr}\frac{dS_1(r)}{dr}=0 \tag{11.14.8}$$

求解(11.14.7)和(11.14.8),我们得到

$$\begin{aligned}S_0(r)&=\int dr\sqrt{2m(E-V(r))}\\S_1(r)&=\text{常数}\\C_0(r)&=\text{常数}\left(\frac{dS_0(r)}{dr}\right)^{-1/2}\\C_1(r)&=\text{常数}\left(\frac{dS_0(r)}{dr}\right)^{-1/2}\end{aligned} \tag{11.14.9}$$

注意,在 $2m(E-V(r))<0$ 时 $S_0(r)$是复数.最后我们得到(需要将 $\hbar$ 的各项进行适当的归并.)

$$u(r)=\text{常数}(2m(E-V(r)))^{-1/4}\exp\left[i\frac{\int dr\sqrt{2m(E-V(r))}}{\hbar}\right] \tag{11.14.10}$$

再由 $R(r)=u(r)/r$ 可得到$R(r)$.

## 补 充 习 题

**11.15** 利用试探波函数族 $\psi=N\exp(-\alpha r^2)$,计算氢原子基态的变分上限并与严格解比较.

**答案** $\langle H\rangle=-11.5\text{eV}$. 精确值为 $-13.6\text{eV}$.

**11.16** 利用变分法计算氢原子的基态能量. 采用如下的试探波函数族:(a) $\psi_1=A_1\exp(-br/a_0)$;(b) $\psi_1=A_2\left(b^2+\frac{r^2}{a_0^2}\right)^{-1}$;(c) $\psi_3=A_3\frac{r}{a_0}e^{-br/a_0}$ 其中 $a_0$ 是玻尔半径. 将你得到的解与严格解对照并讨论其差别. 提示:比较 $\psi_1$、$\psi_2$ 和 $\psi_3$ 与严格波函数的差异.

**答案**　(a) $b=1$，$\langle H\rangle_{\min}=-\frac{e^2}{2a_0}=-E_H$；(b) $b=\frac{\pi}{4}$，$\langle H\rangle_{\min}=-0.81E_H$；(c) $b=\frac{3}{2}$，$\langle H\rangle_{\min}=-0.75E_H$，其中 $E_H$ 是氢原子的基态能量.

**11.17**　利用变分法给出氘核的结合能. 假定质子和中子之间的位势为 $V(r)=A\exp(-r/r_0)$，试探波函数族选为 $\psi(r)=C\exp(-\beta r)$，其中 $A$ 和 $C$ 是归一化常数，$r_0$ 是有效力程.

**答案**　$E=-2.1\text{MeV}$.

**11.18**　说明在中心力场中 WKB 近似的适用条件为 $l\ll1$，其中 $l$ 是角动量量子数. 解释为什么这个近似称为半经典近似.

**答案**　由于角动量的值是 $L=l(l+1)\hbar$，要保证角动量是有限值，角量子数 $l$ 大就意味着($\hbar$)小.

**11.19**　非谐振子的哈密顿算符为 $H=-\frac{d^2}{dx^2}+x^2+x^4$，利用 WKB 近似在 $x\to\infty$ 时给出基态.

**答案**　$\psi\sim\frac{1}{x}\exp\left(\pm\frac{x^3}{3}\right),\quad |x|\to\infty.$

**11.20**　运用 WKB 近似计算电子穿透图 11-4 所示的势垒的穿透系数.

$$V(x)=\begin{cases}V_0-\frac{1}{2}kx^2, & x^2<2V_0/k\\ 0, & \text{其余,}\end{cases}\tag{11.20.1}$$

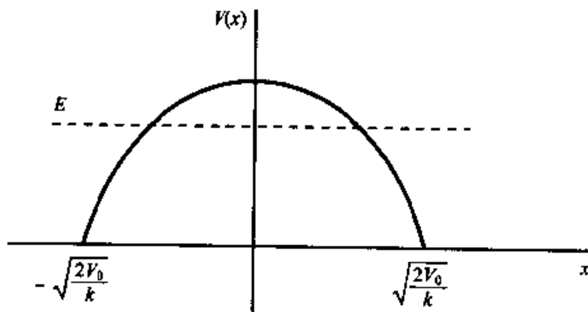



图 11-4

**答案**　$T=\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{-\sqrt{2(V_0+E)/k}}^{\sqrt{2(V_0+E)/k}}\sqrt{2m\left(V_0-\frac{1}{2}kx^2-E\right)}dx\right].$

**11.21**　利用 WKB 近似计算如下势垒的穿透系数：

$$V(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0-kx, & x>0\end{cases}\tag{11.21.1}$$

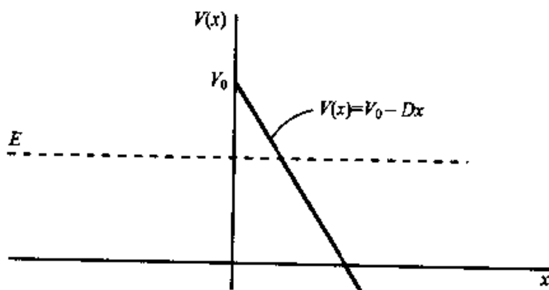



图 11-5

其中 $V_0$ 和 $k$ 是常数.

**答案**

$$T = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{(V_0-E)/k}\sqrt{2m(E-V_0+kx)}\,\mathrm{d}x\right] = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar k}(V_0-E)^{3/2}\right]$$

**11.22** 一个角动量为 0 的粒子从下述中心势场里逃出的概率是多大?

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ \dfrac{\alpha}{r}, & r > a \end{cases} \tag{11.22.1}$$

**答案**

$$P = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^{\alpha/E}\sqrt{2m\left(\frac{\alpha}{r}-E\right)}\mathrm{d}r\right] = \exp\left\{-\frac{2\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\left[\arccos\left(\sqrt{\frac{Ea}{\alpha}}\right)-\sqrt{\frac{Ea}{\alpha}\left(1-\frac{Ea}{\alpha}\right)}\right]\right\}$$

# 第十二章 量子力学的数值方法

## 12.1 数值积分

对于给定的上下限 $a$ 和 $b$ 之间的已知函数 $f(x)$ 的定积分的数值处理是将区间 $[a, b]$ 分成用如下定义的 $N+1$ 个点分成的 $N$ 个小区间

$$a = x_0, x_1, \cdots, x_N = b \tag{12.1}$$

点 $x_i$ 是等距分布的，步长 $h=(b-a)/N$

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0,1,\cdots,N \tag{12.2}$$

然后把积分写成小区间上积分的和

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^{a+h} f(x)\mathrm{d}x + \int_{a+h}^{a+2h} f(x)\mathrm{d}x + \cdots + \int_{b-h}^{b} f(x)\mathrm{d}x \tag{12.3}$$

使得在每个小区间上 $f(x)$ 易于严格求积. 我们将给出两种数值积分方法：第一个方法称为**复化梯形公式**，它将 $f(x)$ 用图 12-1 所示的分段线性函数来逼近.

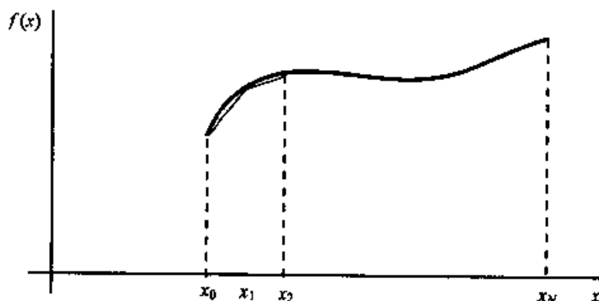



图 12-1

此时积分 $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\mathrm{d}x = [f(x_{i+1}) + f(x_i)]\dfrac{h}{2}$. 若记 $f(x_i)=f_i$，我们有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N\right] \tag{12.4}$$

第二个方法称为**复化 Simpson 公式**. 它基于在相邻的 3 个点上将 $f(x)$ 用 2 次插值多项式来逼近. 此时积分 $\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)\mathrm{d}x \approx h\left[\frac{1}{3}f_i + \frac{4}{3}f_{i+1} + \frac{1}{3}f_{i+2}\right]$，这样，我们有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^{a+2h} f(x)\mathrm{d}x + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)\mathrm{d}x + \cdots + \int_{b-2h}^{b} f(x)\mathrm{d}x$$

$$\approx \frac{h}{3}[f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \cdots + f_N] \tag{12.5}$$

时时应该牢记心中的是这些方法都是积分的近似计算法. 对于大的 $N$，我们可以分析近似的程度. 对于复化梯形公式，误差正比于 $1/N^2$，对于复化 Simoson 公式，误差正比于 $1/N^4$；一般说来，复化 Simpson 公式比复化梯形公式精确一些.

### 12.2 函数方程求根

求函数 $f(x)$ 的根就是解方程 $f(x)=0$. 所有的数值求根方法先都要对根进行某些初始假定,然后通过迭代来逼近根. 由于这些初始假定可能与真实情况相差甚远,收敛快的假定才是好的假定(这时所需的迭代次数较少). 要对 $f(x)$ 的根进行假定,首先要画出 $f(x)$ 的草图.

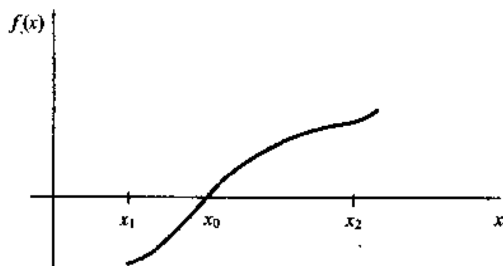



图 12-2

我们来给出 3 种求根方法. 第一种方法称为**对分法**. 这个方法适用于我们要找的根处于图 12-2 中给定的区间 $[x_1,\ x_2]$ 中的情况.

此时我们知道 $f(x_1)$ 和 $f(x_2)$ 异号. 对于一阶迭代,我们在 $x_1$ 和 $x_2$ 的中点上计算 $f(x)$ 的值,并用中点来替换与 $x_1$ 和 $x_2$ 中函数值 $f(x_1)$ 和 $f(x_2)$ 与中点函数值符号相同的那一个点,依此类推,每一次迭代都将含有待求的根的区间的长度减少 1/2,这样我们对根的估计的最大误差(我们取中点作为根的近似估计)不会超过含有待求的根的区间的长度的一半. 记初始区间长度 $\varepsilon_0=|x_2-x_1|$,为使根的误差为 $\varepsilon/2$,我们需要做 $n=\log_2(\varepsilon_0/\varepsilon)$ 次迭代. 只要初始区间 $[x_1,\ x_2]$ 包含根,对分法总是收敛的(此法也可以用来求奇异点).

第二种方法是应用 $f(x)$ 导数的 **Newton-Raphson** 法. 我们从猜测的初始点 $x_1$ 出发,对根的每一个新的近似由前一个近似给出

$$x^{i+1}=x^i-\frac{f(x^i)}{f'(x^i)} \tag{12.6}$$

当 $|x^{i+1}-x^i|$ 小于我们预先给定的误差之后就停止迭代. 为了理解这个方法的实质,我们将(12.6)式写成下式:

$$f(x^i)+f'(x^i)(x^{i+1}-x^i)=0 \tag{12.7}$$

注意到(12.7)的左端就是 $f(x^{i+1})$ 的线性近似. 这实际上相当于把函数 $f(x)$ 用其线性近似来代替.

第三种方法**弦位法**在形式上与 Newton-Raphson 法类似. 我们不计算导数的取值,而近似地以差商来代替导数

$$f'(x^i)\approx\frac{f'(x^i)-f'(x^{i-1})}{x^i-x^{i-1}} \tag{12.8}$$

这样,我们有

$$x^{i+1}=x^i-\frac{x^i-x^{i-1}}{f(x^i)-f(x^{i-1})}f(x^i) \tag{12.9}$$

### 12.3 常微分方程的积分

物理学中有大量求解微分方程的问题. 许多物理上的重要推论都是从微分方程导出的. 我们来给出几种求解如下形式的微分方程的方法

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=f(x,\ y) \tag{12.10}$$

这些方法的精度各有差别,而计算必须达到需要的精度. 此时我们应该选择适当的方法. 注意到高阶方程

$$\frac{d^2y}{dx^2} = F(x, y) \tag{12.11}$$

可以写成

$$\frac{dz}{dx} = F(x, y),\ z = \frac{dy}{dx} \tag{12.12}$$

它们也能用同样的办法求解.*

第一个方法是 **Euler 法**. 它最简单,而精确度也最差. 将(12.1)写成差分方程

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = f(x, y) \tag{12.13}$$

或即

$$\Delta y = f(x, y)\Delta x \tag{12.14}$$

从起始点 $y_0 = y(x_0)$开始通过迭代计算 $y(x)$的值

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)(x_{n+1} - x_n) \tag{12.15}$$

记迭代的步长为 $\Delta x = x_{n+1} - x_n = h$(在计算中取为常数);这样有

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)h \tag{12.16}$$

点$(x_{n+1}, y_{n+1})$只与$(x_n, y_n)$有关. 迭代的精度主要依赖于步长 $h$ 的选择:$h$ 越小精度越高. $y_{n+1}$的误差正比于 $h^2$.

第二种方法是 Runge-Kutta 法. 它基于在 Euler 法中将 $f(x, y)$用泰勒级数进行展开. 泰勒展开的阶数越高(高阶 Runge-Kutta 法),精确度也就越高. 考虑 2 阶 Runge-Kutta 法

$$y_{n+1} = y_n + k_2 \tag{12.17}$$

其中

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + h/2,\ y_n + k_1/2) \end{cases} \tag{12.18}$$

误差正比于 $h^3$. 类似地,3 阶 Runge-Kutta 法为

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \tag{12.19}$$

其中

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + h/2,\ y_n + k_1/2) \\ k_3 = hf(x_n + h,\ y_n - k_1 + 2k_2) \end{cases} \tag{12.20}$$

误差正比于 $h^4$. 4 阶 Runge-Kutta 法为

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{12.21}$$

其中

---

* 这里的说法有问题. 高阶的方程对应的是一阶方程组,而方程组的数值求解与方程的数值求解的区别还是很大的 ——译者注.

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + h/2, y_n + k_1/2) \\ k_3 = hf(x_n + h/2, y_n + k_2/2) \\ k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3) \end{cases} \tag{12.22}$$

误差正比于 $h^5$. 依此类推.

薛定谔方程是 2 阶微分方程. 上述方法需要知道波函数和其导数在给定点处的取值. 由于波函数的导数的值常常是不知道的,我们代之以求解波函数的边值问题. 我们在此给出一种求解二阶常微分方程的边值问题的方法——Numerov 算法.

Numerov 算法经常用来求解下型的方程:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + k^2(x)y = S(x) \tag{12.23}$$

利用二阶导数的三点差分公式[注:这是一个近似公式]

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y''_n + \frac{h^2}{12} y''''_n \tag{12.24}$$

其中 $y''_n$ 和 $y''''_n$ 分别是 $y$ 在 $x_n$ 处的二阶导数和四阶导数. 利用(12.23),我们有

$$y''''_n = \frac{d^2}{dx^2}[-k^2(x)y + S(x)]|_{x=x_n} \tag{12.25}$$

记 $k(x_n)=k_n$, $S(x_n)=S_n$. 我们得到

$$y''''_n = -\frac{1}{h^2}[k^2_{n+1}y_{n+1} - 2k^2_n y_n + k^2_{n-1}y_{n-1}] + \frac{1}{h^2}[S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}] \tag{12.26}$$

将(12.26)代入(12.23),我们得到

$$\left(1 + \frac{h^2}{12}k^2_{n+1}\right)y_{n+1} - 2\left(1 - \frac{5h^2}{12}k^2_n\right)y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}k^2_{n-1}\right)y_{n-1} = \frac{h^2}{12}(S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}) \tag{12.27}$$

其中截断误差正比于 $h^6$. 这个误差小于 4 阶 Runge-Kutta 法的误差*.

注:下面所有的程序都是用通常的 FORTRAN77 写出并在 IBM AIX RS-6000 工作站上编译通过. 精度都取成 REAL * 4.

## 习 题 解 答

**12.1** 写出一个 FORTRAN 子例行程序

```
SUBROUTINE Simpson(FUNC, a, b, s)
INTEGER N
REAL FUNC(0:10000), a, b, s
```

利用复化 Simpson 公式来计算 FUNC 从 $a$ 到 $b$ 的积分. FUNC(0:$N$)是一个 $N+1$ 维

---

* Numerov 算法实际上是常微分方程边值问题的差分算法的一个改进. 原著中对这一算法的叙述并不完全. 实际上缺少了对边值的模拟——而这正是这一方法的精髓所在. 现根据文献简述如下:

设方程(12.23)的边值条件为 $y(0)=a, y(1)=b$, 在(0,1)中撒上 $n-1$ 个等距的点 $x_k$, 并定义 $y_0=a$, $y_n=b$; $x_k=k/n$; $h=1/n$. 这样(12.27)就变成了 $y_0$ 和 $y_n$ 已知的一个差分方程. 它的求解问题对应于一个三对角线性方程组的求解. 可用线性代数中的数值计算技巧来处理——译者注.

的数组,给出了被积函数在 $N+1$ 个间距为 $h=(b-a)/N$ 的点上的值. 积分的值放在 $s$ 中.

**解答**　由复化 Simpson 公式.

$$S=\frac{h}{3}[\mathrm{FUNC}(0)+4*\mathrm{FUNC}(1)+2*\mathrm{FUNC}(2)+4*\mathrm{FUNC}(3)+\cdots+\mathrm{FUNC}(N)] \tag{12.1.1}$$

对于奇数和偶数的 $N$,我们要分开处理. 下面是一种可能的处理方法:

```
s=FUNC(0)+FUNC(N)
让 i 从 1 到 N-1 循环
如果 i 是偶数
s=s+2FUNC(i)
其他情况
s=s+4FUNC(i)
结束循环
s=s·(B-A)/(3*N)
```

这个算法用 FORTRAN77 实现如下:

```
C* *计算定积分
SUBROUTINE Simpson(FUNC,N, a, b, s)
INTEGER N
REAL FUNC(0:1000),a, b, s
s=0
s=FUNC(0)+FUNC(N)
DO 1 i=1, N-1
C* *mod(i, 2)在 i 是偶数时为 0,在 i 是奇数时为 1.
s=s+2*2**(MOD(i, 2))*FUNC(i)
1 CONTINUE
  s=s*(b-a)/(3*N)
  RETURN
  END
```

**12.2** 利用 Simpson 方法写出一个程序来计算下面的积分:

$$\int_a^b e^{x^2}\,dx \tag{12.2.1}$$

程序的输入为由 12.1 给出的 $a$, $b$ 和 $N$. 对于不同的 $N$ 和 $a=0,b=1$,计算到 $1\times10^{-2}$ 精度.

**解答**　例 12.2 的程序

```
INTEGER N
REAL FUNC(0:1000),a, b, s
REAL x, h

C* *给出积分上下限
WRITE(*,*)'Enter the intaval bounds a and b:'
READ (*,*)a, b
```

```
C**定义结果的输出文件
OPEN (UNIT=1, FILE='result.txt')
WRITE(1,*)'The value of the integral of the function exp(x**2)'
10 FORMAT('from', f4.2, 'to',f4.2)
  WRITE(1,10) a, b
  WRITE(1,*)'N s The Integral'

C**输入分点数 N.
2WRITE(*,*)'Enter the number of points N(0<N<1001)'
  WRITE(*,*)'Enter N<0 th stop'
  READ(*,*) N
  IF (n.GT.1000.OR.n.LT.1) GOTO 3

C**计算步长
h=(b-a)/N

C**计算 N 点上的函数值.
DO 1 i=0, N
  x=a+h*FLOAT(i)
  FUNC(i)=EXP(x*x)
1 CONTINUE

C**计算积分
CALL Simpson(FUNC,N,a,b,s)

C**打印结果
WRITE(1,*)N,s
WRITE(*,*)N,s
GOTO 2
3 STOP
END

C**计算定积分的子程序
SUBROUTINE Simpson(FUNC,N,a, b, s)
INTEGER N
REAL FUNC(0:1000),a, b, s
s=0
s=FUNC(0)+FUNC(N)
DO 1 i=1, N-1
C**mod(i, 2)在 i 是偶数时为 0,在 i 是奇数时为 1.
s=s+2*2**(MOD(i, 2))*FUNC(i)
1 CONTINUE
  s=s*(b-a)/(3*N)
  RETURN
  END
```

程序运行的结果是

```
N S The Integral   N    S    The Integral
10 1.347725272     100  1.4  50347781
20 1.402942777     110  1.4  51459050
30 1.422343731     120  1.4  52386498
40 1.432232141     130  1.4  53171015
50 1.438225508     140  1.4  53844905
60 1.442246556     150  1.4  54429030
70 1.445130706     200  1.4  56477404
80 1.447300673     500  1.4  60176587
90 1.448992372     1000  1.4  61413145
```

计算积分的子例行程序就是我们在 12.1 中编制的子例行程序. 大量应用子例行程序能够提高程序的可读性,但会降低运算速度.

输出的结果给出了 $a=0$, $b=1$ 时的 $N$ 和 $S$. 我们看出不同的 $N$ 值对应于不同的 $S$ 值,对于较大的 $N, S$ 的数值比较稳定,即取值变化不大. 我们看出在 $N=80$ 以后,$S$ 小数点后的两位就不发生变化了. 这说明我们已经达到了 $1\times10^{-2}$ 的精度.

**12.3** 分别利用弦位法($x_1=0$, $x_2=1$)和 Newton-Raphson 法($x_1=1$)写出两个用于求解方程 $\cos x=x$ 的 FORTRAN 程序. 精确度取为小数点后 5 位.

**解** 注意到图 12-3 中画出的函数 $y=\cos x$ 和 $y=x$ 的图像.

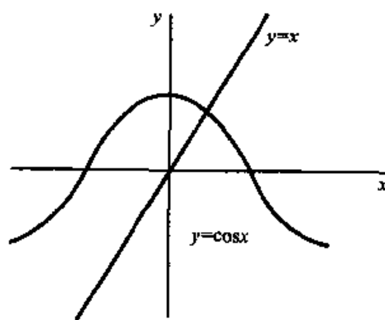



图 12-3

$\cos x-x=0$ 的解对应于 $y=\cos x$ 和 $y=x$ 的交点对应的 $x$ 值. 由图 12-3 看出这个交点在区间[0,1]中,从 $x_1=0$, $x_2=1$ 开始弦位法的计算较为合适. 对于每次迭代我们都得到新值 XM $=(x_1+x_2)/2$,并将其与 XM 前一次的迭代值 XMOLD 比较. 如果 XM 和 XMOLD 之间的差异小于 $1\times10^{-5}$,我们就得到了 5 位有效数字. 程序的一种写法如下:

程序 12.3－1

```
REAL x1, x2, XM, XMOLD
REAL toler, f1, f2, fm, f
INTEGER iter

C* *迭代数初始化
iter=0

C* *初始假设
x1=0
x2=1
XM=(x1+x2)/2
XMOLD=x1

C* *最大误差
toler=0.00001

C* *当新一轮迭代值不等于旧一轮的迭代值时的继续进行迭代的条件.
DO WHILE(ABS(XM-XMOLD).GT.toler)
Iter=iter+1
```

```
C* *计算不同点处的函数值
f1 = f(x1)
f2 = f(x2)
fm = f(XM)
IF ((fm * f1).LT.0) THEN

C* *当f(XM)的符号与f(x2)相同时:
x2 = XM
ELSE

C* *当f(XM)的符号与f(x1)相同时:
x1 = XM
ENDIF

C* *存储前一次迭代的结果
XMOLD = XM

C* *新一轮迭代
XM = (x1 + x2)/2
END DO

C* *打印结果
WRITE(*,*)'The zero of f(x) is:',XM
10 FORMAT('obtained after',iter,'iterations.')
WRITE(*,10)iter
STOP
END

C* *待求零点的函数的定义
REAL FUNCTION f(x)
REAL x
F = COSx - x
RETURN
END
```

程序运行的结果是:

The zero of f(x) is 0.7390823364
obtained after 16 iterations.

与此类似,运用 Newton-Raphson 法只需要给出一个初始迭代值. 应用相同的迭代停止条件,我们有 $x^{i+1} = x^i - f(x^i)/f'(x^i)$. 当 $f(x^i)/f'(x^i)$小于误差时迭代停止.

程序 12.3-2

```
REAL x1
REAL f1, df1, toler
INTER iter

C* *迭代数初始化.
```

```
iter=0

C**误差的上限
toler=0.00001

C**初始条件
x1=1

C**计算函数 f(x)=cosx-x 和其导数在 x=x1 点的取值:
f1=COS(x1)-x1
df1=-1*SIN(x1)-1

C**当新一轮迭代值不同于旧一轮迭代值时继续进行迭代的条件
DO WHILE(ABS(f1/df1).GT.toler)

C**新一轮迭代
iter=iter+1

C**计算函数 f(x)=cosx-x 和其导数在 x=x1 点的取值:
x1=x1-f1/df1
f1=COS(x1)-x1
df1=-1*SIN(x1)-1
END DO

C**打印结果:
WRITE(*,*)'The zero of f(x) is:',x1
10 FORMAT('obtained after',iter'iterations.')[译者注:原文为"10 FORMAT('obtained after',i3,
'iterations.')". 这里"i3"明显是笔误. 现改正之.]
WRITE(*,10) iter
STOP
END
```

运行结果是:

The zero off(x)is 0.7390851378

obtained after 3 iterations.

我们看到 Newton-Raphson 方法只用了 3 次迭代就得到了与弦位法 16 次迭代的同样精度的结果,这说明 Newton-Raphson 方法的收敛速度快于弦位法. 但是对于某些 Newton-Raphson 方法发散的情况,弦位法却是收敛的.

**12.4** 一个电子在如下势场中运动,求其最低的束缚态能量

$$V(x)=\begin{cases}-V_0, & 0\leqslant z\leqslant a\\ \infty, & z<0\\ 0, & \text{其余}\end{cases}\tag{12.4.1}$$

其中 $a=2\text{Å}$, $V_0=10\text{eV}$(见图 12-4).

**解答**　对于束缚态 $-V_0<E<0$,薛定谔方程为(见第三章)

$$\psi=0,\ z<0\tag{12.4.2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dz^2}-V_0\psi=E\psi, 0\leqslant z\leqslant a\tag{12.4.3}$$

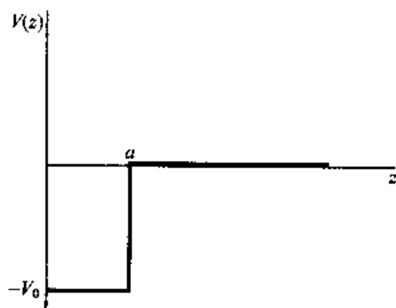



图 12-4

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dz^2}=E\psi,\ a<z \qquad (12.4.4)$$

利用条件$\frac{d^2\psi}{dz^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\psi, E+V_0>0$,从方程(12.4.3)得到

$$\psi(z)=A_1\sin(k_1z)+B_1\cos(k_1z),\quad 0<z<a \qquad (12.4.5)$$

其中 $k_1=\sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2}$ 与之类似,(12.4.4)给出$\frac{d^2\psi}{dz^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$. 对应的解为

$$\psi=A_2e^{k_2z}+B_2e^{k_2z},\ a<z \qquad (12.4.6)$$

其中 $k_2=\sqrt{-2mE/\hbar^2}$.波函数应该满足边界条件 $\psi(z\to\infty)=0$ 和 $\psi(z\to-\infty)=0$. $z\to-\infty$的边界条件已经自动满足,而 $z\to\infty$的边界条件要求 $A_2=0$. 由波函数的连续性,它在 $z=0$ 处必须满足条件 $B_1=0$,而且

$$A_1\sin(k_1a)+B_1\cos(k_1a)=B_2e^{-k_2a}\quad (z=a) \qquad (12.4.7)$$

这给出 $A_1\sin(k_1a)=B_2e^{-k_2a}$. 类似地,利用 $\psi^1$ 的连续性条件,我们有

$$A_1k_1\cos(k_1a)=-B_2k_2e^{-k_2a}\quad (z=a) \qquad (12.4.8)$$

综合两者,最后有

$$k_1\cot(k_1a)=-k_2 \qquad (12.4.9)$$

求解(12.4.9)可以得到电子的能量本征态. 最小的能量对应于最小的 $k_1$ 和 $k_2$,我们必须用数值方法求解这个方程来给出 $k_1$ 和 $k_2$ 的最小取值. 为此我们将 $k_2$ 用 $k_1$ 表示出来:

$$k_1^2=+\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0),\quad k_2^2=-\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (12.4.10)$$

由此 $2mV_0/\hbar^2=k_1^2+k_2^2$,或即 $k_2=\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}-k_1^2}$. 这样 $-\cot(k_1a)=\sqrt{2mV_0/\hbar^2-k_1^2}/k_1$. 将 $k_1a$ 记成 $x$,我们有

$$-\cot x=\frac{\sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2-x^2}}{x} \qquad (12.4.11)$$

为得到最小的能量,我们在图 12-5 中画出 $y_1=-\cot x$ 和$y_2=\frac{\sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2-x^2}}{x}$的图像并计算 $y_1$ 和 $y_2$ 的第一个交点对应的 $x$ 值.

$2mV_0a^2/\hbar^2$ 的值为 10.498597. 对于下面的函数,我们利用题 12.3 中的程序来进行计算*.

```
C* *待求零点的函数
REAL FUNCTION f(x)
REAL x
f=TAN(x)+SQRT(10.49859654100631-x*x)
RETURN
END
```

* 程序 12.3-1 和程序 12.3-2 都是对于函数 $\cos x-x$ 写出的. 在应用到本题中时需要把函数和初始条件改动一下. 程序的结构是不用改动的. 不过程序 12.3-2 编制得都不太符合模块化的原则. 如果把待求根的函数作为一个外挂的函数子程序就好了. 建议读者自己去完成这项工作. 而下面的程序实际上是外挂在程序 12.3-1 上的函数子程序 ——译者注.

从图 12-5 看出 x 值位于区间[2,3]；而此为运算的初始条件．对程序 12.3－1 做适当的修改[改动 x1、XM 和 x2 的初始赋值．]后运行得到

The zero of f(x) is 2.336280823

obtained after 16 iterations.

此即 $k_1 a = \sqrt{2ma^2(E+V_0)/\hbar^2} = 2.33628$，从而最小的能量为

$$E + V_0 = 5.2\text{eV} \tag{12.4.12}$$

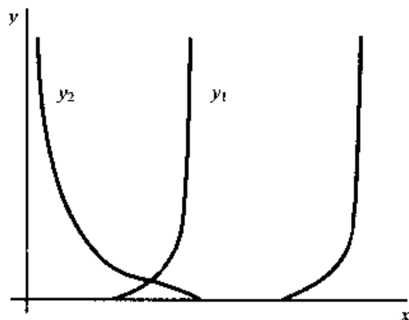



图 12-5

**12.5** 应用 Numerov 算法，写出一个求解电子在势阱中运动的薛定谔方程的程序

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant a \\ \infty, & \text{其余} \end{cases} \tag{12.5.1}$$

其中 $a = 1\text{Å}$．程序的输入为猜测的基态能级，而输出为经过修正的基态能级．将结果于严格解对照*．

**解** 本题中的薛定谔方程为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{12.5.2}$$

引入无量纲变量 $\xi = x/a$，方程化为

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + \frac{2ma^2E}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{12.5.3}$$

它属于下面形式的方程

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k^2(x)y = S(x) \tag{12.5.4}$$

这里 $S(x)=0$，$k^2(x) = \text{const.} = 2mEa^2/\hbar^2$．在程序中，我们输入一个初始 $k$ 值，从 $\psi(0)=0$(psim)开始，通过应用 Numerov 方法求解关于 $k$ 写下的方程来计算 $\psi(\xi=1)$(psip)，然后再将 $k$ 加上 d$k$，重复上述计算．在每一轮迭代中我们都把 $k$ 加上 d$k$，一直到新的 psip 与上一轮的 psip 符号相反，此时我们将 $k$ 退回到上一轮时的 $k$ 值，再选择一个较小的 d$k$……一直到 d$k$ 小于 $1\times10^{-5}$ 为止．我们相信用这种方法可以找到我们想要找的 $k$**．取初始的 $k$ 值为 0，我们得到本题后面的结果．我们希望这个解收敛于基态，因为这是最接近于 $E=0$ 的状态．

程序 12.5

```
REAL k
REAL toler, psip, psiold

C * * 读取波数 k 的初始值
WRITE( * , * ),'Enter the starting value of the wave number k: + (k<0 to stop)'
READ( * , * ) k
```

---

* Numerov 算法是用来近似求解常微分方程边值问题的方法，本来不能用来求解常微分方程的本征值问题．而本题正好是常微分方程本征值问题，因而笔者认为这题出得有问题．而后面的解法也不是什么 Numerov 方法．

此处还应该有波函数的边界条件 $\psi(x=0)=0$ 和 $\psi(x=a)=0$ ——译者注．

** 这样做的理由是：对于不同的 $k$，$\xi=1$ 处的波函数值可以假定是 $k$ 的连续函数．而对于严格解来说，这个值为 0．因此如果对于两个不同的 $k$ 值计算出来的 $\xi=1$ 处的波函数值异号的话，在这两个 $k$ 值之间必存在一个 $k$ 值使得 $\xi=1$ 处的波函数为 0．这个思路把在一般情况下难以处理的右端边界条件的处理简化了．只是此法类似于"打靶法"，却不是 Numerov 法 ——译者注．

```
IF (k.LT.0) GOTO 20

C* *输入 k 的初始步长
dk=1
toler=1.E-05

C* *对于初始的 k 值求解方程
CALL integrt(k, psip)

C* *改变 k 值
10 k=k+dk
psiold=psip

C* *对于不同的 k 值求解方程
CALL intgrt(k, psip)

C* *psip 若变号就退回
IF((psip*psiold). LT.0) THEN
k=k-dk
dk=dk/2
ENDIF

C* *计算停止的条件
IF(ABS(dk). GT.toler) GOTO 10
WRITE(*,*)''
WRITE(*,*)'The result is:'
WRITE(*,*) k
20 STOP
END

C* *用 Numerov 法求解 Schrodinger 方程的子例行程序
SUBROUTINE intgrt(k, psip)
REAL k,psim,psiz, h, const
INTEGER nstep

C* *迭代步数
nstep=100

C* *步长值
h=1./nstep

C* *左端边界条件
psim=0
psiz=0.01*
const=(k*h)* *2/12
```

* 此处在运用区间左端的边界条件的基础上，随意地假定了另一个初始迭代值(因为编程时用来计算波函数的递推公式是二阶的)．这种拼凑的方法对于较为一般问题会引起严重的不可控制的误差！这是本程序的败笔 ——译者注.

```
DO 10 ix=1.nstep-1

C* * Numerov算法:
psip=2*(1.-5*const)*psiz-(1.+const)*psim
psip=psip/(1.+const)
psim=psiz
psiz=psip
10 CONTINUE
C* * 中间结果
WRITE(*,*) 'The wave number:',k
RETURN
END
```

对于初始的 k=0.0 运行程序,得到如下结果

```
The wave number:
    1.000000000 3.250000000 3.142578125 3.141601562
    2.000000000 3.187500000 3.141601562 3.141540527
    3.000000000 3.156250000 3.141113281 3.141601562
    4.000000000 3.140625000 3.141601562 3.141571045
    3.500000000 3.156250000 3.141357422 3.141601562
    3.250000000 3.148437500 3.141601562 3.141586304
    3.125000000 3.144531250 3.141479492 3.141601562
The result is 3.141586304.
```

考虑本题的严格解,本征能量为

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \tag{12.5.5}$$

基态能量为 $E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$对应于 $k_1=\sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}E_1}=\pi=3.1415926\cdots$.

**12.6** 对于球对称势 $V(x,y,z)=V(r)$和柱对称势 $V(x,y)=V(\rho)$的薛定谔方程,给出数值求解的步骤.

**解答** 对于中心势场 $V(r)$,薛定谔方程的特解有下式:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{R(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{12.6.1}$$

其中 $Y_{lm}(\theta,\phi)$是球谐函数,$R(r)$是 $r$ 的函数,它满足径向方程

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2M}{\hbar^2}\left[E-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}-V(r)\right]R(r)=0 \tag{12.6.2}$$

其中 $E$,$l$ 和 $M$ 分别是本征能量,角动量和质量. 方程(12.6.2)具有方程(12.23)的形式,其中

$$S(r)=0,\ k^2(r)=\frac{2M}{\hbar^2}\left[E-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}-V(r)\right] \tag{12.6.3}$$

这个方程可以用 Numerov 算法进行数字处理(见题 12.5). 与此类似,对于柱对称势 $V(\rho)$,方程的特解可写成下式:

$$\psi(\rho,\phi,z)=\frac{R(\rho)}{\sqrt{\rho}}e^{im\phi}e^{inz} \tag{12.6.4}$$

其中 $m$ 是 $z$ 方向的角动量,$n$ 是整数,而 $V(\rho)$是 $\rho$ 的函数,它满足方程

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2M}{\hbar^2}\left[\frac{\hbar^2}{8M\rho^2}-\frac{\hbar^2(m^2+n^2)}{2M}+E-V(\rho)\right]R(\rho)=0 \tag{12.6.5}$$

其中 $E$ 和 $M$ 分别是本征能量和质量. 这个方程也具有(12.23)的形式,其中

$$S(\rho)=0,\ k^2(\rho)=\frac{2M}{\hbar^2}\left[\frac{\hbar^2}{8M\rho^2}-\frac{\hbar^2(m^2+n^2)}{2M}+E-V(r)\right] \qquad (12.6.6)$$

因此这个方程也能用 Numerov 方法求解.

## 补 充 习 题

**12.7** 编制一个 FORTRAN 子例行程序

```
SUBROUTINE Trapez(FUNC, N, a, b, s)
INTEGER N
REAL FUNC(0:1000), a, b, s
```

这个程序通过由数组 FUNC 给出的被积函数在区间$[a, b]$中 $N+1$ 点上的值来计算积分. 步长为 $h=(b-a)/N$.

**答案**

```
C* *计算定积分的子例行程序
SUBROUTINE Trapez(FUNC, N, a, b, s)
INTEGER N
REAL FUNC(0:1000),a, b, s
s=0
s=(FUNC(0)+FUNC(N))/2
DO 1 i=1, N-1
C* *MOD(i, 2)在 i 为偶数时为 0,在 i 为奇数时为 1
s=s+FUNC(i)
1 CONTINUE
s=s*(b-a)/N
RETURN
END
```

**12.8** 自选一种方法对题 5.3 中的积分进行数值计算

$$P_0=1-\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 e^{-\eta^2}\,d\eta \qquad (12.8.1)$$

**答案** 利用程序 12.2,将 FUNC(i)=EXP(x*x)改成 FUNC(i)=2/SQRT(ACOS(-1.))*EXP(-x*x),并在调用 Simpson 子例行程序之后加上一行 s=1-s 就行了. 计算的结果为 $P_0=0.1578$.

**12.9** 利用初始值 $x_1=2$ 和 $x_2=3$ 求解方程 $x^2-5=0$. 利用弦位法进行计算

$$x^{i+1}=x^i-f(x^i)\frac{x^i-x^{i-1}}{f(x^i)-f(x^{i-1})} \qquad (12.9.1)$$

精确到 $1\times10^{-5}$.

**答案** 程序 12.9*

```
REAL x1, x2, xtemp
REAL f1, f2, toler
INTEGER iter

C* *初始化迭代数
iter=0

C* *误差上限
toler=0.00001

C* *初始值
x1=2.
```

```
x2=3.

C**计算在x1和x2点上f(x)=x^2-5的函数值
f1=x1*x1-5
f2=x2*x2-5

C**将新一轮迭代给出的结果与旧一轮迭代的结果误差范围内进行比较
DO WHILE (ABS(x2-x1).GT. toler)

C**新一轮迭代
iter=iter+1
xtmp=x2-f2*(x2-x1)/(f2-f1)
x1=x2
x2=xtemp

C**计算在x1和x2点上f(x)=x^2-5的函数值
f1=x1*x1-5
f2=x2*x2-5
END DO

C**打印结果
WRITE(*,*)'The zero of f(x) is:',x1
10 FORMAT('obtained after',iter,'iterations.')
WRITE(*,10)iter
STOP
END
```

# 第十三章 全同粒子

## 13.1 引论

假如你有一个篮球而你的朋友有一个重量相同的足球,二人同时以同样的速度把球向对方踢去. 这样就会出现两种情况:(a) 两个球对头碰撞后弹回到各自主人的方向. (b) 两个球沿平行的轨道滚到对方的手中. 由于球的颜色和形状彼此不同,我们是很容易知道具体是(a)还是(b)发生了. 但是如果两个球完全一样,我们就搞不清楚了. 对于量子力学中的全同粒子,情况甚至更加糟糕,因为我们根本无法给出粒子的轨道. 本章我们将讨论由全同粒子构成的系统的有关性质.

## 13.2 置换与波函数的对称性

**定义** 如果系统中的粒子不能通过观察来区分粒子的置换状态,就称之为全同粒子. 粒子的不可区分性给出了系统的某种对称性. 考虑一个由 $n$ 个状态为 $|\phi_i\rangle(i=1,\cdots,n)$ 的全同粒子构成的系统($i=1,\cdots,n$). 记这个系统的状态为 $||\phi_1\rangle,|\phi_2\rangle,\cdots,|\phi_n\rangle\rangle$. 注意! $|\phi_1\rangle,\cdots,|\phi_n\rangle$ 的不同次序对应于不同的状态,例如在 $n=2$ 时, $||\phi_1\rangle,|\phi_2\rangle\rangle\neq||\phi_2\rangle|\phi_1\rangle\rangle$ 如果 $\sigma$ 是 $1,\cdots,n$ 的一个写成下式的置换:

$$\sigma=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & \cdots & n\\ \sigma(1) & \sigma(2) & \sigma(3) & \cdots & \sigma(n)\end{pmatrix}\tag{13.1}$$

在 $\sigma$ 作用后, $1,\cdots,n$ 变成 $\sigma(1),\cdots,\sigma(n)$. $\sigma$ 将系统的状态变为

$$\sigma(||\phi_1\rangle,\cdots,|\phi_n\rangle\rangle)=(||\phi_{\sigma(1)}\rangle,\cdots,|\phi_{\sigma(n)}\rangle\rangle)\tag{13.2}$$

此时 $\sigma$ 是状态空间里的一个线性算符. 置换 $\sigma$ 可以写成对换——只涉及 2 个指标的特殊置换——的乘积. 如果 $\sigma$ 的分解式中包含的对换的个数为偶数,我们称之为偶置换,此时记 $\mathrm{sgn}(\sigma)=1$;如果包含的对换个数为奇数,则称之为奇置换, $\mathrm{sgn}(\sigma)=-1$. 如果 $\sigma|u\rangle=|u\rangle$ 对于任意的 $\sigma$ 成立,则称态矢 $||\phi_1\rangle,\cdots,|\phi_n\rangle\rangle$ 为对称的:如果 $\sigma|u\rangle=-|u\rangle$ 对于任意的 $\sigma$ 成立,则称态矢 $||\phi_1\rangle\cdots|\phi_n\rangle\rangle$ 为反对称的. 定义投影算符

$$\hat{S}=\frac{1}{n!}\sum_\sigma\sigma\tag{13.3}$$

和

$$\hat{A}=\frac{1}{n!}\sum_\sigma(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma\tag{13.4}$$

$\hat{S}$ 和 $\hat{A}$ 把状态空间 $H$ 分别投影到两个子空间上:对称态构成的空间 $H_S$ 和反对称态构成的空间 $H_A$

$$H_S=\hat{S}H,\qquad H_A=\hat{A}H\tag{13.5}$$

任意的反对称波函数能够写成 $|u_A\rangle=\hat{A}|u\rangle$ 其中 $|u\rangle=||\phi_1\rangle\cdots|\phi_n\rangle\rangle$. 如果 $\{|\phi^{(j)}\rangle\}$ 是单粒子态空间的一组基,则 $n$ 粒子反对称波函数空间的基可以由 $\hat{A}$ 作用到 $||\phi_1^{j_1}\rangle\cdots|\phi_n^{j_n}\rangle\rangle$ 上来得出;即

$$|\alpha_{j_1,\cdots,j_n}\rangle=\hat{A}|(|\phi_1^{j_1}\rangle,|\phi_2^{j_2}\rangle,\cdots,|\phi_n^{j_n}\rangle)=\sum_\sigma\frac{1}{n!}(\mathrm{sgn}\sigma)(|\phi_1^{\sigma(1)}\rangle,\cdots,|\phi^{j_{\sigma(n)}}\rangle)$$

或

$$|\alpha_{j_1,\cdots,j_n}\rangle = \frac{1}{n!}\begin{vmatrix} |\phi_1^{j_1}\rangle & |\phi_1^{j_2}\rangle & \cdots & |\phi_1^{j_n}\rangle \\ |\phi_2^{j_1}\rangle & |\phi_2^{j_2}\rangle & \cdots & |\phi_2^{j_n}\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |\phi_n^{j_1}\rangle & |\phi_n^{j_2}\rangle & \cdots & |\phi_n^{j_n}\rangle \end{vmatrix} \tag{13.6}$$

是 $H_A$ 的一组基. 后一个等式利用了行列式的性质(有时这个公式被用来定义行列式. ). 这个行列式称为 Slater 行列式,它是无相互作用 Fermi 子薛定谔方程的解.

### 13.3　Bose 子和 Fermi 子

实验观测告诉我们,似乎存在两种微观粒子. 一种具有完全对称的波函数,这种粒子称为 Bose 子;第二种具有完全反对称的波函数,称为 Fermi 子. 迄今还没有发现具有中间对称性的粒子. 对于全同 Fermi 子,我们有泡利不相容原理它认定两个全同 Fermi 子不可能处子相同的量子态中. 另一个表述是:在同一个量子态中找到两个全同 Fermi 子的概率为 0.

## 例 题 解 答

**13.1**　(a) 计算 $n$ 个符号的置换的个数;(b) 说明两个置换的乘积还是置换.

**解答**　(a) 置换的个数等于 $n$ 个不同的符号按照不同的顺序的排列数. 第一个符号有可能的 $n$ 个位置,第二个符号有 $n-1$ 个可能的位置,依此类推,第 $n$ 个符号只有 1 个可能的位置. 由此,我们有 $n!$ 个置换.

(b) 置换 $\sigma$ 是集合$\{1,\cdots,n\}$到自身的一个一一映射,即当 $i\neq j$ 时,$\sigma(i)\neq\sigma(j)$,且任意 $i$ 都等于某一个 $j$ 对应的$\sigma(j)$. 两个这样的函数的复合仍旧是$\{1,\cdots,n\}$到自身的一个一一映射,因此也是一个置换.

**13.2**　证明 $\hat{S}$和 $\hat{A}$是厄米算符.

**证明**　设 $\sigma$ 是一个置换,记$|u\rangle=||\phi_1\rangle\cdots|\phi_n\rangle\rangle$和$|v\rangle=||\theta_1\rangle\cdots|\theta_n\rangle\rangle$;这样

$$\begin{aligned}\langle v|\sigma u\rangle &= \langle\langle\theta_1|,\cdots,\langle\theta_n||\phi_{\sigma(1)}\rangle,\cdots,|\phi_{\sigma(n)}\rangle\rangle = \langle\theta_1|\phi_{\sigma(1)}\rangle\langle\theta_2|\phi_{\sigma(2)}\rangle\cdots\langle\theta_n|\phi_{\sigma(n)}\rangle \\ &= \langle\theta_{\sigma^{-1}(1)}|\phi_1\rangle\langle\theta_{\sigma^{-1}(2)}|\phi_2\rangle\cdots\langle\theta_{\sigma^{-1}(n)}|\phi_n\rangle = \langle v\sigma^{-1}|u\rangle\end{aligned} \tag{13.2.1}$$

这样 $\sigma^\dagger=\sigma^{-1}$,从而

$$\hat{S}^\dagger = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma置换}\sigma^\dagger = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma置换}\sigma^{-1} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma置换}\sigma = \hat{S} \tag{13.2.2}$$

同样地

$$\hat{A}^\dagger = \frac{1}{n!}\sum_\sigma(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma^\dagger = \frac{1}{n!}\sum_\sigma(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma^{-1} = \frac{1}{n!}\sum_\sigma(\mathrm{sgn}\sigma^{-1})\sigma^{-1} = \frac{1}{n!}\sum_\sigma(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma = \hat{A} \tag{13.2.3}$$

**13.3**　证明对于任意的状态$|u\rangle$,$\hat{S}|u\rangle$是对称的而 $\hat{A}|u\rangle$是反对称的.

**证明**　我们从证明对于任意的置换 $\tau$ 都有$\tau(\hat{S}|u\rangle)=\hat{S}|u\rangle$出发来证明 $\hat{S}|u\rangle$是对称态.

$$\tau\hat{S}|u\rangle = \tau\frac{1}{n!}\sum_\sigma\sigma|u\rangle = \frac{1}{n!}\sum_\sigma\tau\sigma|u\rangle = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma'}\sigma'|u\rangle = \hat{S}|u\rangle \tag{13.3.1}$$

类似的

$$\begin{aligned}\tau\hat{A}|u\rangle &= \tau\frac{1}{n!}\sum(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma|u\rangle = \frac{1}{n!}\sum(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma\tau|u\rangle \\ &= (\mathrm{sgn}\tau)^{-1}\frac{1}{n!}\sum_\sigma(\mathrm{sgn}\sigma)(\mathrm{sgn}\tau)\sigma\tau|u\rangle = (\mathrm{sgn}\tau)\frac{1}{n!}\sum_\sigma(\mathrm{sgn}\sigma\tau)\sigma\tau|u\rangle\end{aligned}$$

$$= (\mathrm{sgn}\tau)\frac{1}{n!}\sum_{\sigma}(\mathrm{sgn}\sigma')\sigma'|u\rangle = (\mathrm{sgn}\tau)\hat{A}|u\rangle \tag{13.3.2}$$

这是因为置换的全体构成一个群，它的每一个元素都存在逆．而且

$$\sum\sigma = \sum\sigma^{-1} = \tau\sum\sigma \tag{13.3.3}$$

再利用 $\mathrm{sgn}(\sigma\tau)=\mathrm{sgn}(\sigma)\mathrm{sgn}(\tau)$ 就可以证明上式了．

**13.4** 证明(a) $\hat{S}^2=\hat{S}$；(b) $\hat{A}^2=\hat{A}$；(c) $\hat{A}\hat{S}=\hat{S}\hat{A}=0$

**证 明**　(a) 利用题 13.3 的结果我们得到

$$\hat{S}^2 = \left(\frac{1}{n!}\sum_{\sigma}\rho\right)\hat{S} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}\rho\hat{S} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}\rho\hat{S} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}\hat{S} = \frac{n!}{n!}\hat{S} = \hat{S} \tag{13.4.1}$$

(b) 如(a)中所示

$$\hat{A}^2 = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma\hat{A} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}(\mathrm{sgn}\sigma)(\mathrm{sgn}\sigma)\hat{A} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}1\cdot\hat{A} = \hat{A} \tag{13.4.2}$$

(c) 由定义

$$\hat{A}\,\hat{S} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}(\mathrm{sgn}\sigma)\sigma\hat{S} = \frac{1}{n!}\hat{S}\sum_{\sigma}\mathrm{sgn}\sigma = 0 \tag{13.4.3}$$

和

$$\hat{S}\,\hat{A} = \frac{1}{n!}\sum_{\sigma}\rho\hat{A} = \frac{1}{n!}\hat{A}\sum_{\sigma}\mathrm{sgn}\sigma = 0 \tag{13.4.4}$$

**13.5** 利用 Fermi 子的对称性假定导出泡利不相容原理．

**解 答**　对于 Fermi 子态的对称性假定是：假定 $n$ 个全同 Fermi 子的波函数是全反对称的．它是 $|a_{j_1\cdots j_n}\rangle$ 形式的右矢的线性组合．归一化的右矢为

$$|a_{j_1\cdots j_n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\begin{vmatrix} |\phi_1^{j_1}\rangle & |\phi_1^{j_2}\rangle & \cdots & |\phi_1^{j_n}\rangle \\ |\phi_2^{j_1}\rangle & |\phi_2^{j_2}\rangle & \cdots & |\phi_2^{j_n}\rangle \\ \vdots & & & \vdots \\ |\phi_n^{j_1}\rangle & & \cdots & |\phi_n^{j_n}\rangle \end{vmatrix} \tag{13.5.1}$$

如果两个粒子处在同一个量子态，由于行列式中的两列完全相同，行列式为 0．这个结果就验证了泡利不相容原理成立．

**13.6** 证明两个全同 Fermi 子的 Slater 行列式是反对称的．

**证 明**　两个 Fermi 子的 Slater 行列式为

$$|u(1,2)\rangle = \frac{1}{2!}\begin{vmatrix} |\phi_1^{j_1}\rangle & |\phi_1^{j_2}\rangle \\ |\phi_2^{j_1}\rangle & |\phi_2^{j_2}\rangle \end{vmatrix} = \frac{1}{2}(|\phi_1^{j_1}\rangle|\phi_2^{j_2}\rangle - |\phi_1^{j_2}\rangle|\phi_2^{j_1}\rangle) \tag{13.6.1}$$

即

$$|u(2,1)\rangle = \frac{1}{2}(|\phi_2^{j_1}\rangle|\phi_1^{j_2}\rangle - |\phi_2^{j_2}\rangle|\phi_1^{j_1}\rangle) \tag{13.6.2}$$

易知 $|u(2,1)\rangle = -|u(1,2)\rangle$．

**13.7** 证明 Slater 行列式是 $n$ 个无相互作用的全同 Fermi 子的薛定谔方程的能量本征态*．

**证 明**　考虑薛定谔方程 $\hat{H}(1,2,\cdots,n)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$．忽略粒子之间的相互作用，我们记 $\hat{H}_0(1,\cdots,n)$ 为

---

* 原题为："Show that the Salter determinant is a zero-order approximation to the Schrodinger epuation of a system of n identical fermions."．这题出得不清楚．现根据下面的解答重新编题——译者注．

$$\hat{H}_0(1,2,\cdots,n) = \hat{H}_0(1) \oplus \cdots \oplus \hat{H}_0(2) \qquad (13.7.1)$$

对于每一个 $\hat{H}_0(i)$,我们有 $\hat{H}_0(i)|\phi_i^j\rangle = E_i^j|\phi_i^j\rangle$其中 $i$ 代表粒子的标号而$j$ 标记不同的本征值和本征态. 由于 Slater 行列式是$|\,|\phi_1^{j_1}\rangle\cdots|\phi_n^{j_n}\rangle\rangle$形式的本征函数的线性组合,而粒子间无相互作用,右矢

$$|u_{1A}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left|\begin{matrix} |\phi_1^{j_1}\rangle & |\phi_1^{j_2}\rangle & \cdots & |\phi_1^{j_n}\rangle \\ |\phi_2^{j_1}\rangle & |\phi_2^{j_2}\rangle & \cdots & |\phi_2^{j_n}\rangle \\ \vdots & & & \vdots \\ |\phi_n^{j_1}\rangle & & \cdots & |\phi_n^{j_n}\rangle \end{matrix}\right\rangle \qquad (13.7.2)$$

也是薛定谔方程 $\hat{H}_0|\psi\rangle = E|\psi\rangle$的一个解.

**13.8** 三个虚构的"无自旋"Fermi 子被限制在长度为 $L$ 的一维箱子里运动,限制对应的势能为

$$V = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant L \\ \infty, & \text{其余} \end{cases} \qquad (13.8.1)$$

假定 Fermi 子间无相互作用. (a) 系统的基态是什么? (b) 构造系统的基态.

**解答** (a) 由第三章中的结果,单个 Fermi 子的本征态为

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right),\ E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2} \qquad (13.8.2)$$

由于两个 Fermi 子不能处于同一个量子态,三个 Fermi 子必须处于不同的状态. 对于基态,这三个状态必须为 $\psi_1$、$\psi_2$ 和 $\psi_3$,总能量为$\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(1^2+2^2+3^2)$. 系统的一个唯象描述由图 13-1 给出:

(b) 系统反对称的基态由下式给出:

$\psi$= (归一化因子) × (Slater 行列式)

$$= \frac{1}{\sqrt{3!}}\left|\begin{matrix} |\psi_1(x_1)\rangle & |\psi_2(x_1)\rangle & |\psi_3(x_1)\rangle \\ |\psi_1(x_2)\rangle & |\psi_3(x_2)\rangle & |\psi_3(x_2)\rangle \\ |\psi_1(x_3)\rangle & |\psi_2(x_3)\rangle & |\psi_3(x_3)\rangle \end{matrix}\right| \qquad (13.8.3)$$

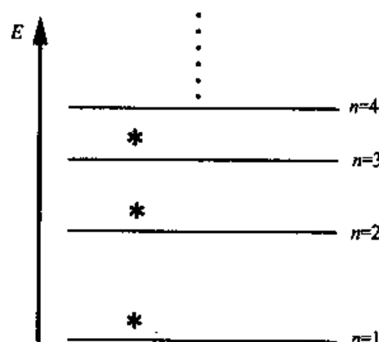



图 13-1

**13.9** 对于三个电子,重解题 13.8. 假定忽略电子间的 Coulomb 相互作用.

**解答** (a) 电子自旋为 1/2,其对应的本征值和本征态为

$$\psi_n^+ = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\ \psi_n^- = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \qquad (13.9.1)$$

其中 $E_n = \pi^2\hbar^2n^2/2mL^2$. 由于每个能级都对应于两个量子态——自旋向上或向下,附加的自由度自旋使得我们能够把 2 个电子放在第一个能级上. 这样我们得到在图 13-2 中画出的 2 个可能的基态. (b)对于图 13-2 左边的那个态,三个粒子所处的状态为 $\psi_1^-$、$\psi_1^-$、$\psi_2^+$;对于图 13-2 右边的那个态,三个粒子所处的状态为 $\psi_1^+$、$\psi_1^-$、$\psi_2^-$. 利用 Slater 行列式我们得到

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}\left|\begin{matrix} |\psi_1^+(x_1)\rangle & |\psi_1^-(x_1)\rangle & |\psi_3^+(x_1)\rangle \\ |\psi_1^+(x_2)\rangle & |\psi_1^-(x_2)\rangle & |\psi_2^+(x_2)\rangle \\ |\psi_1^+(x_3)\rangle & |\psi_1^-(x_3)\rangle & |\psi_2^+(x_3)\rangle \end{matrix}\right| \qquad (13.9.2)$$

和

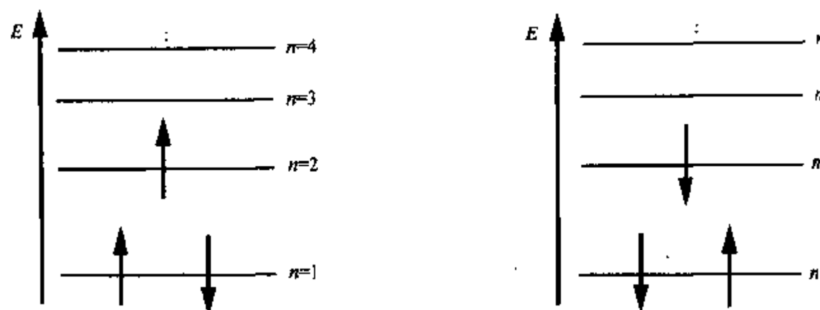



图 13-2

$$\psi_t = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |\psi_1^+(x_1)\rangle & |\psi_1^-(x_1)\rangle & |\psi_2^-(x_1)\rangle \\ |\psi_1^+(x_2)\rangle & |\psi_1^-(x_2)\rangle & |\psi_2^-(x_2)\rangle \\ |\psi_1^+(x_3)\rangle & |\psi_1^-(x_3)\rangle & |\psi_2^-(x_3)\rangle \end{vmatrix} \tag{13.9.3}$$

**13.10** 一个系统由两个自旋为 1/2 的 Fermi 子构成. 如果两个电子处在不同的归一化状态中,给出"两粒子密度函数"和"单粒子密度函数".

**解答** 假定两个电子分别处于自旋不同的状态 $|\phi_1(\boldsymbol{r});+\rangle$ 和 $|\phi_2(\boldsymbol{r});-\rangle$. 此时系统有波函数

$$|\psi(1,2,\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\rangle = (|\phi_1(\boldsymbol{r}_1);+\rangle|\phi_2(\boldsymbol{r}_2);-\rangle - |\phi_1(\boldsymbol{r}_2);+\rangle|\phi_2(\boldsymbol{r}_1);-\rangle)/\sqrt{2} \tag{13.10.1}$$

这样

$$\rho_{\text{two par.}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \langle\psi|\psi\rangle = (|\phi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2|\phi_2(\boldsymbol{r}_2)|^2 + |\phi_1(\boldsymbol{r}_2)|^2|\phi_2(\boldsymbol{r}_1)|^2)/2 \tag{13.10.2}$$

以及

$$\rho_{\text{one par.}}(\boldsymbol{r}_1) = \int\rho_{\text{two par.}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)d^3r_2 = (|\phi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2 + |\phi_2(\boldsymbol{r}_1)|^2)/2 \tag{13.10.3}$$

如果两个电子处于自旋相同的状态,我们有

$$|\psi(1,2,\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\rangle = (|\phi_1(\boldsymbol{r}_1);\pm\rangle|\phi_2(\boldsymbol{r}_2);\pm\rangle - |\phi_1(\boldsymbol{r}_2);\pm\rangle|\phi_2(\boldsymbol{r}_1);\pm\rangle)/\sqrt{2} \tag{13.10.4}$$

和

$$\begin{aligned}\rho_{\text{two par.}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = (&|\phi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2|\phi_2(\boldsymbol{r}_2)|^2 - 2\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_2(\boldsymbol{r}_1)\phi_1(\boldsymbol{r}_2)\phi_2(\boldsymbol{r}_2) \\ &+ |\phi_1(\boldsymbol{r}_2)|^2|\phi_2(\boldsymbol{r}_1)|^2)/2\end{aligned} \tag{13.10.5}$$

**13.11** 一个量子系统由两个无自旋全同粒子构成. 单粒子态可用正交右矢 $\{|\phi_k\rangle\}$ 展开. 设两个粒子所处的状态分别为 $|\phi_i\rangle$ 和 $|\phi_j\rangle(i\neq j)$. (a) 计算两个粒子分别处于 $|\xi\rangle$ 和 $|\eta\rangle$ 态中的概率(不一定是系统的本征态);(b) 计算某一个粒子处在 $|\xi\rangle$ 态的概率;(c) 假定这两个粒子不是全同的,但是所用的观测仪器不能区分两个粒子. 重新回答问题(a)和(b).

**解答** (a) 系统的原始状态是对称态

$$\Phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_i^{(1)}\rangle|\phi_j^{(2)}\rangle + |\phi_j^{(1)}\rangle|\phi_i^{(2)}\rangle) \tag{13.11.1}$$

新态也是对称的

$$\Phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\xi^{(1)}\rangle|\eta^{(2)}\rangle + |\xi^{(2)}\rangle|\eta^{(1)}\rangle) \tag{13.11.2}$$

所求的概率为

$$P_1 = |\langle\Phi_1|\Phi_2\rangle|^2 = |\langle\xi|\phi_i\rangle\langle\eta|\phi_j\rangle + \langle\eta|\phi_i\rangle\langle\xi|\phi_j\rangle|^2 \tag{13.11.3}$$

(b) 构造两个粒子分别处于$|\xi\rangle$和$|\phi_k\rangle$态中的对称态

$$|\Phi_{\xi,\phi_k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\xi^{(1)}\rangle|\phi_k^{(2)}\rangle + |\phi_k^{(1)}\rangle|\xi\rangle) \tag{13.11.4}$$

为了计算某一个粒子处在$|\xi\rangle$中的概率,将$|\Phi_{\xi,\phi_k}\rangle$用$\langle\Phi_1|$(原来的态)左乘并对$k$求和

$$\begin{aligned} P_2 &= \sum_k |\langle\Phi_1|\Phi_{\xi,\phi_k}\rangle|^2 = \sum_k |\langle\phi_i|\xi\rangle\langle\phi_j|\phi_k\rangle + \langle\phi_j|\xi\rangle\langle\phi_i|\phi_k\rangle|^2 \\ &= \sum_k |\langle\phi_i|\xi\rangle\delta_{jk} + \langle\phi_i|\xi\rangle\delta_{ik}|^2 = |\langle\phi_i|\xi\rangle|^2 + |\langle\phi_j|\xi\rangle|^2 \end{aligned} \tag{13.11.5}$$

(c)* 系统的两个可能状态分别为对称态$(|\phi_i^{(1)}\rangle|\phi_j^{(2)}\rangle + |\phi_j^{(1)}\rangle|\phi_i^{(2)}\rangle)/\sqrt{2}$和反对称态$(|\phi_i^{(1)}\rangle|\phi_j^{(2)}\rangle - |\phi_i^{(1)}\rangle|\phi_j^{(2)}\rangle)/\sqrt{2}$两个粒子分别处于$|\xi\rangle$和$|\eta\rangle$中的可能状态也有对称态$(|\xi^{(1)}\rangle\ \eta^{(2)}\rangle + |\xi^{(2)}\rangle|\eta^{(1)}\rangle)/\sqrt{2}$和反对称态$(|\xi^{(1)}\rangle|\eta^{(2)}\rangle - |\xi^{(2)}\rangle|\eta^{(1)}\rangle)/\sqrt{2}$两种. 注意到对称态与反对称态之间的内积为0;我们得到(a)的解:

对于对称态

$$P_1 = |\langle\xi|\phi_i\rangle\langle\eta|\phi_j\rangle + \langle\eta|\phi_i\rangle\langle\xi|\phi_j\rangle|^2 \tag{13.11.6}$$

对于反对称态

$$P_1 = |\langle\xi|\phi_i\rangle\langle\eta|\phi_j\rangle + \langle\eta|\phi_i\rangle\langle\xi|\phi_j\rangle|^2 \tag{13.11.7}$$

而(b)的解为

$$P_2 = \sum_k |\langle\Phi_1|\Phi_{\xi,\phi_k}\rangle|^2 = |\langle\phi_i|\xi\rangle|^2 + |\langle\phi_j|\xi\rangle|^2 \tag{13.11.8}$$

**13.12** 设区域$D$中有$n$个全同 Fermi 子,$D$外边还有其他的全同 Fermi 子,并忽略处在不同区域里的粒子之间的相互作用. 说明如果只考虑区域$D$中的物理现象,只需把$D$中的$n$个粒子的波函数反对称化,不需要考虑区域外边的那个粒子. 将结果用于$n=2$个 Fermi 子的情况(对于 Bose 子有同样的结果)**.

**解答**　设$|\chi\rangle$和$|\phi\rangle$是物理的$n$粒子反对称态. 这些函数在$D$外为零. 忽略其余的粒子的存在,在系统处于$|\phi\rangle$态时,观测到系统处于$|\chi\rangle$态的概率$p_n$为$|\langle\chi\|\phi\rangle|^2$. 在区域$D$外而有$M$个全同粒子时,$|\chi\rangle$态和$|\phi\rangle$态对应的$n+m$粒子态为

$$|\chi'\rangle = \frac{1}{(n+m)!}\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\cdot\sigma(|\xi\rangle|\chi\rangle)$$

和

$$|\phi'\rangle = \frac{1}{(n+m)!}\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\sigma(|\zeta\rangle|\phi\rangle)$$

其中$|\xi\rangle$和$|\zeta\rangle$为在$D$中为0的$m$粒子反对称态,$\sigma$为$n+m$阶置换. 对应的,在系统处于$|\phi'\rangle$态时,观测到系统处于$|\chi'\rangle$态的概率$p_{n+m}$为$|\langle\chi'\|\phi'\rangle|^2$. 由$\mathrm{sgn}(\sigma)=\mathrm{sgn}(\sigma^{-1})$, $\sigma=\sigma^{-1}$得知

$$\langle\chi'|\phi'\rangle = \left(\frac{1}{n+m!}\right)^2 \sum_{\sigma\sigma'} \mathrm{sgn}(\sigma)\mathrm{sgn}(\sigma')\langle\chi|\xi|\sigma^{-1}\sigma'|\zeta\rangle|\phi\rangle$$

---

* 原文为"The state of the system is now$|\phi_1\rangle$Hence, by mutiplying with the final state$\langle\xi^{(1)}|\langle\eta^{(2)}| + \langle\xi^{(2)}|\langle\eta^{(1)}|$we obtain(13.11.6) and (13.11.7)". 这个结论是完全错误的. 因为两个粒子本非全同粒子,尽管实验上无法区分两个粒子. 但两个粒子无法区分的状态除了全对称态之外还有全反对称态. 而由于 Pauli 原理和自旋-统计关系在此时也不成立,反对称态并不能去掉! 现重新做出解答 ——译者注.

** 现重新写出本题的证明. 原证明又麻烦又晦涩 ——译者注.

$$= \left(\frac{1}{(n+m)!}\right)^2 \sum_{\sigma\sigma'} \mathrm{sgn}(\sigma^{-1}\sigma') \langle \chi \mid \langle \xi \mid \sigma^{-1}\sigma' \quad \xi \rangle \mid \phi \rangle$$

令 $\sigma^{-1}\sigma' = \tau, \sigma' = \tau'$，上式化为

$$\langle \chi' \mid \phi' \rangle = \left(\frac{1}{(n+m)!}\right)^2 \sum_{\tau,\tau'} \mathrm{sgn}(\tau) \langle \chi \mid \xi \mid \tau \mid \zeta \rangle \mid \phi \rangle$$

$$= \frac{1}{(n+m)!} \sum_{\tau} \mathrm{sgn}(\tau) \langle \chi \mid \xi \mid \tau \mid \zeta \rangle \mid \phi \rangle \tag{13.12.1}$$

注意到 $\tau$ 中只有 $m!\ n!$ 个把 $D$ 中的粒子和 $D$ 外的粒子分别进行置换的元素，其他的 $\tau$ 均是把 $D$ 中的粒子和 $D$ 外的粒子混合的置换．由于 $D$ 中的粒子的波函数和 $D$ 外的粒子波函数正交，(13.12.1)化为

$$\langle \chi' \cdot \phi' \rangle = \frac{1}{(n+m)!} \sum_{\lambda\lambda'} \mathrm{sgn}(\lambda)\mathrm{sgn}(\lambda') \langle \chi \mid \xi \mid \lambda\lambda' \mid \zeta \rangle \mid \phi \rangle$$

$$= \frac{1}{(n+m)!} \sum_{\lambda} \mathrm{sgn}(\lambda) \langle \chi \mid \lambda \mid \phi \rangle \sum_{\lambda'} \mathrm{sgn}(\lambda') \langle \xi \mid \lambda' \mid \xi \rangle$$

其中 $\lambda$、$\lambda'$ 分别是 $n$ 阶和 $m$ 阶置换．再由

$$\frac{1}{n!} \sum_{\lambda} \mathrm{sgn}(\lambda) \lambda \mid \phi \rangle = \mid \phi \rangle$$

$$\frac{1}{m!} \sum_{\lambda'} \mathrm{sgn}(\lambda') \lambda' \mid \zeta \rangle = \mid \zeta \rangle$$

可得到

$$\langle \chi' \mid \phi' \rangle = \frac{n!\,m!}{(n+m)!} \langle \chi \mid \phi \rangle \langle \xi \mid \zeta \rangle$$

这就是我们要得到的结果——它说明在计算任意状态之间的内积时 $D$ 内粒子的波函数和 $D$ 外粒子的波函数的贡献可以完全分开．取 $n=2$ 即可得到 2 个 Fermi 子的情况下的公式．

## 补 充 习 题

**13.13** 证明 Bose 子不满足泡利不相容原理．

**13.14** 验证三个 Fermi 子的 Slater 行列式是反对称的．

**13.15** 证明实轴上的任意函数都是奇函数和偶函数之和

$$f(x) = \frac{f(x)+f(-x)}{2} + \frac{f(x)-f(-x)}{2}$$

**13.16** 当 $|\phi_1\rangle, \cdots, |\phi_n\rangle$ 线性相关时，Slater 行列式会有什么变化？

**答案** 为零．

**13.17** 三个全同粒子被约束于势阱中

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant a, 0 \leqslant y \leqslant b \\ \infty, & \text{其他} \end{cases} \tag{13.17.1}$$

当粒子是 Bose 子时构造系统的基态．

**答案** $|\psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3)\rangle = |\phi_{1,1}(\boldsymbol{r}_1)\phi_{1,1}(\boldsymbol{r}_2)\phi_{1,1}(\boldsymbol{r}_3)\rangle$

其中 $\phi_{n_x, n_y}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{ab}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right)$．

**13.18** 应用题 13.14 的结果给出三个无自旋(考虑泡利不相容原理，但忽略自旋自由度)Fermi 子系统的基态．

**答案**

$$|\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)\rangle=\frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix}|\phi_{11}(\boldsymbol{r}_1)\rangle & |\phi_{12}(\boldsymbol{r}_1)\rangle & |\phi_{21}(\boldsymbol{r}_1)\rangle\\ |\phi_{11}(\boldsymbol{r}_2)\rangle & |\phi_{12}(\boldsymbol{r}_2)\rangle & |\phi_{21}(\boldsymbol{r}_2)\rangle\\ |\phi_{11}(\boldsymbol{r}_3)\rangle & |\phi_{12}(\boldsymbol{r}_3)\rangle & |\phi_{21}(\boldsymbol{r}_3)\rangle\end{vmatrix}$$

**13.19**　在考虑自旋时重解题 13.14 和题 13.18.

**答案**

$$|\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)\rangle=\frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix}|\phi^+_{11}(\boldsymbol{r}_1)\rangle & |\phi^-_{11}(\boldsymbol{r}_1)\rangle & |\phi^-_{12}(\boldsymbol{r}_1)\rangle\\ |\phi^+_{11}(\boldsymbol{r}_2)\rangle & |\phi^-_{11}(\boldsymbol{r}_2)\rangle & |\phi^-_{12}(\boldsymbol{r}_2)\rangle\\ |\phi^+_{11}(\boldsymbol{r}_3)\rangle & |\phi^-_{11}(\boldsymbol{r}_3)\rangle & |\phi^-_{12}(\boldsymbol{r}_3)\rangle\end{vmatrix}$$

用$|\phi^+_{12}\rangle$代替$|\phi^-_{12}\rangle$可以得到另外 1 个可能的状态.

**13.20**　对于两个 Bose 子重解题 13.10.

**答案**

$$|\Phi(1,2,\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\rangle=|\phi_1(\boldsymbol{r}_1);S_1\rangle|\phi_2(\boldsymbol{r}_2);S_2\rangle+|\phi_1(\boldsymbol{r}_2);S_1\rangle|\phi_2(\boldsymbol{r}_1);S_2\rangle$$

$$\rho_{\text{two par.}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\begin{cases}|\phi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2|\phi_2(\boldsymbol{r}_2)|^2+|\phi_1(\boldsymbol{r}_2)|^2|\phi_2(\boldsymbol{r}_1)|^2, & S_1\neq S_2\\ |\phi_1(\boldsymbol{r}_1)\phi_2(\boldsymbol{r}_2)+\phi_1(\boldsymbol{r}_2)\phi_2(\boldsymbol{r}_1)|^2, & S_1=S_2\end{cases}$$

$$\rho_{\text{one par}}(\boldsymbol{r}_1)=\int\rho_{\text{two}}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_2=|\phi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2+|\phi_2(\boldsymbol{r}_1)|^2$$

# 第十四章 角动量(续)

## 14.1 引论

考虑两个角动量 $j_1$ 和 $j_2$. 这些角动量既可能是两个不同粒子的角动量,也可以是同一个粒子的角动量(轨道与自旋). 两个角动量作用于不同的态空间,其分量之间互相对易. 其对应的本征态由通常的记号(如第六章)$|j_1, m_1\rangle$和$|j_2, m_2\rangle$表示

$$\begin{cases} j_1^2 |j_1 m_1\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1)|j_1 m_1\rangle \\ j_{1z}|j_1 m_1\rangle = \hbar m_1 |j_1 m_1\rangle \end{cases} \tag{14.1}$$

$j_2$ 的结果与之类似. 复合系统的状态空间为两个角动量各自的状态空间的直积(张量积)

$$|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle = |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \equiv |m_1 m_2\rangle \tag{14.2}$$

对于给定的 $j_1$ 和 $j_2$, $m_1$ 和 $m_2$ 的取值为

$$\begin{cases} m_1 = -j_1, -j_1+1, \cdots, j_1 \\ m_2 = -j_2, -j_2+1, \cdots, j_2 \end{cases} \tag{14.3}$$

其中集合$\{j_1, m_1\}$和$\{j_2, m_2\}$的元素同为整数或半整数. 复合系统态空间的维数为$(2j_1+1)(2j_2+1)$. 用这种办法构造的状态$|m_1, m_2\rangle$是算符$\{|j_1|^2, |j_2|^2, j_{1z}, j_{2z}\}$的公共本征态.

## 14.2 $\{|j_1|^2, |j_2|^2, |J|^2, J_z\}$对应的基

假定 $j_1$ 和 $j_2$ 与系统的哈密顿算符 $H_0$ 对易. * 不考虑 $j_1$ 和 $j_2$ 之间的相互作用时, $|J, M\rangle$是系统的本征态. 如果在 $H_0$ 上加上如下形式的相互作用:

$$H = H_0 + \alpha j_1 \cdot j_2 (\alpha \text{ 是耦合常数}) \tag{14.4}$$

则 $j_1$ 和 $j_2$ 不再守恒,但 $J = j_1 + j_2$ 依然守恒. 此时我们在算符$\{j_1^2, j_2^2, J^2, J_z\}$的本征态构成的基下考虑问题. 这组基里的本征态$|j_1 j_2 JM\rangle \equiv |JM\rangle$由下式给出:

$$\begin{cases} J^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1)|JM\rangle \\ J_z |JM\rangle = \hbar M |JM\rangle \end{cases} \tag{14.5}$$

此处

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \cdots, j_1 + j_2 \tag{14.6}$$

且对于第一个 $J$ 的取值

$$M = -J, -J+1, \cdots, J \tag{14.7}$$

注意到

$$j_1^2 |JM\rangle = \hbar^2 j_1(j_1+1)|JM\rangle \tag{14.8}$$

运用等式

---

* 原著中没有这一句. 但是从上下文来看是必须加上的——译者注.

$$2\boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{j}_2 = \boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{j}_1^2 - \boldsymbol{j}_2^2 \tag{14.9}$$

我们得到

$$\boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{j}_2 |JM\rangle = \frac{\hbar^2}{2}[J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]|JM\rangle \tag{14.10}$$

这样$|J,M\rangle$也是$\boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{j}_2$的本征态.在通常的符号系统里,我们将$|J,M\rangle$称为耦合表象里的本征态,而将$|m_1,m_2\rangle$称为非耦合表象里的本征态.

### 14.3 CG 系数

两组正交基$|m_1,m_2\rangle$和$|J,M\rangle$之间由幺正变换联系.即$|J,M\rangle$可用$|m_1,m_2\rangle$展开成下式:

$$|JM\rangle = \sum_{m_1,m_2} \langle m_1 m_2 | JM\rangle | m_1 m_2\rangle \tag{14.11}$$

其中$\langle m_1, m_2 | JM\rangle$称为 CG(Clebsch-Gordon)系数.CG 系数的一般形式是可以得到的.但是更简单的办法是对于具体的情况进行具体分析.这个构造方法是将$J_\pm = J_x \pm iJ_y$多次作用于$|J,M\rangle$上并利用下面的公式:

$$\begin{cases} J_\pm |JM\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}\,|J, M\pm 1\rangle \\ J_{1\pm} | m_1 m_2\rangle = \hbar\sqrt{J_1(J_1+1) - m_1(m_1+1)}\,| m_1 \pm 1, m_2\rangle \end{cases} \tag{14.12}$$

和相位约定

$$|J = J_1 + J_2, M = (j_1 + j_2)\rangle = | m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle \tag{14.13}$$

下面给出与 CG 系数相关的一些等式:

$$\langle m_1 m_2 | JM\rangle = 0 \text{ 除非 } M = m_1 + m_2 \tag{14.14}$$

$$\langle m_1 m_2 | JM\rangle \text{ 是实的} \tag{14.15}$$

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle JM | m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | J'M'\rangle = \delta_{JJ'}, \delta_{MM'} \tag{14.16}$$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^{J} \langle m_1 m_2 | JM\rangle \langle JM | m'_1 m_2\rangle = \delta_{m_1 m'_1}\ \delta_{m_2 m'_2} \tag{14.17}$$

$$\sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}\langle m_1 m_2 | J, M+1\rangle = \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)}\,| m_1 \mp 1, m_2 | JM\rangle + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)}\langle m_1, m_2 \mp 1 | JM\rangle \tag{14.18}$$

$$\langle m_2 m_1 | JM\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\langle m_1 m_2 | JM\rangle \tag{14.19}$$

$$\langle -m_1, -m_2 | J, -M\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\langle m_1, m_2 | JM\rangle \tag{14.20}$$

## 例 题 解 答

**14.1** 考虑两个角动量$j_1$和$j_2$,系统的总角动量为$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$,其中$\boldsymbol{J}_1$和$\boldsymbol{J}_2$互相对易.设$|m_1,m_2\rangle$和$|J,M\rangle$分别是算符$\{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$和$\{\boldsymbol{J}_1^2, \boldsymbol{J}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_z\}$的公共本征态.(a)给出$m_1$和$m_2$的可能取值;(b)给出$J$和$M$的可能取值;(c)验证耦合系统的状态空间

的维数为

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2J+1)=(2j_1+1)(2j_2+1) \tag{14.1.1}$$

其中 $j_1$ 和 $j_2$ 是角量子数.

**解答** (a)记 $|j_1,m_1\rangle$ 为 $\{|J_1|^2,J_{1z}\}$ 分别对应于本征值 $\hbar^2[j_1(j_1+1)]$ 和 $\hbar m_1$ 的公共本征态. 类似的, $|j_2,m_2\rangle$ 为 $\{|J_2|^2,J_{2z}\}$ 分别对应于本征值 $\hbar^2 j_2(j_2+1)$ 和 $\hbar m_2$ 的公共本征态. 耦合系统的态空间是两个角动量各自对应的状态空间的张量积. 即

$$|j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle=|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle=|m_1,m_2\rangle \tag{14.1.2}$$

其中 $j_1$ 和 $j_2$ 是角量子数. $m_1$ 和 $m_2$ 的可能取值为

$$\begin{cases}m_1=-j_1,\ -j_1+1,\cdots,j_1\\ m_2=-j_2,\ -j_2+1,\cdots,j_2\end{cases} \tag{14.1.3}$$

其中 $\{j_1,m_1\}$ 和 $\{j_2,m_2\}$ 同时是整数或半整数. 耦合空间的维数(基 $|J,M\rangle$ 中线性无关的本征态的个数.)为 $(2j_1+1)(2j_2+1)$.

(b)耦合系统的状态空间是固定的角动量 $J$ 对应的正交子空间的直和. 即

$$|JM\rangle=\sum_{m_1,m_2}\langle m_1m_2|JM\rangle|m_1m_2\rangle \tag{14.1.4}$$

其中 $\langle m_1m_2|JM\rangle\propto\delta_{M,m_1+m_2}$ 是 CG 系数. 假定 $j_1>j_2$, 我们有

$$J=j_1-j_2,j_1-j_2+1,\cdots,j_1+j_2 \tag{14.1.5}$$

对于每一个 $J$, $M$ 的可能取值为

$$M=-J,\ -J+1,\cdots,J \tag{14.1.6}$$

每个(14.4)中的总角动量 $J$ 对应于一个 $(2J+1)$ 维的子空间.

(c)利用(b)的结果, 取 $J=j_1-j_2+i$, (14.1.1)的左边变为

$$\begin{aligned}\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2J+1)&=\sum_{i=0}^{2j_2}[2(j_1-j_2+i)+1]\\ &=\frac{1}{2}[(2j_1-2j_2-1)+(2j_1+2j_2+1)](2j_2+1)\\ &=(2j_1+1)(2j_2+1)\end{aligned} \tag{14.1.7}$$

**14.2** 考虑两个角动量 $j_1$ 和 $j_2$, 系统的总角动量为 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$, 非耦合表象的基为 $|m_1m_2\rangle\equiv|j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle$. $|m_1,m_2\rangle$ 是 $\{j_1^2,j_2^2,J_{1z},J_{2z}\}$ 的公共本征态, $J_z=J_{1z}+J_{2z}$, (a)给出 $J_z$ 的可能取值和简并度; (b)考虑状态

$$\begin{cases}|\psi_+\rangle=|m_1=j_1,m_2=j_2\rangle\\ |\psi_-\rangle=|m_2=-j_1,m_2=-j_2\rangle\end{cases} \tag{14.2.1}$$

其中 $m_1$ 和 $m_2$ 分别取到最大值和最小值. 证明 $|\psi_+\rangle$ 和 $|\psi_-\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2(J_z)$ 本征态, 并求出其对应的本征值.

**解答** (a)基矢 $|m_1,m_2\rangle$ 满足

$$\begin{cases}j_1^2|m_1m_2\rangle=\hbar^2j_1(j_1+1)|m_1m_2\rangle\\ j_2^2|m_1m_2\rangle=\hbar^2j_2(j_2+1)|m_1m_2\rangle\end{cases} \tag{14.2.2}$$

其中是 $j_1$ 和 $j_2$ 确定的数, 且有

$$\begin{cases} J_{1z}|m_1m_2\rangle = \hbar m_1|m_1m_2\rangle & ,m_1 = -j_1, -j_1+1,\cdots,j_1 \\ J_{2z}|m_1m_2\rangle = \hbar m_2|m_1m_2\rangle & ,m_2 = -j_2, -j_2+1,\cdots,j_2 \end{cases} \tag{14.2.3}$$

其中 $m_1$ 和 $m_2$ 是整数或半整数. 利用(14.2.2),我们得到

$$J_z|m_1m_2\rangle = (J_{1z}+J_{2z})|m_1m_2\rangle = \hbar(m_1+m_2)|m_1m_2\rangle \equiv \hbar M|m_1m_2\rangle \tag{14.2.4}$$

作为推论,$J_z$ 的本征值是 $\hbar M$,其中量子数 $M=m_1+m_2$ 有如下取值

$$M = -(j_1+j_2), -(j_1+j_2)+1,\cdots,j_1+j_2 \tag{14.2.5}$$

简并度随 $M$ 的变化关系 $g(M)$ 有如下性质:

1. $M=M_{max}=j_1+j_2$ 不简并

$$g(j_1+j_2) = 1 \tag{14.2.6}$$

2. $M$ 减少 1,简并度就增加 1,一直到 $M=|j_1-j_2|$ 时简并度达到最大为止. 在 $M\leqslant|j_1-j_2|$ 时简并度等于

$$g(M)=j_1+j_2+1-|j_1-j_2| \tag{14.2.7}$$ *

3. 在 $M\leqslant-|j_1-j_2|$ 时,$M$ 减少 1,简并度就减少 1. $M=M_{min}=-(j_1+j_2)$ 不简并. $g(M)$ 是 $M$ 的偶函数

$$g(-M) = g(M) \tag{14.2.8}$$

(b)由(14.2.7)和(14.2.8)得知,状态 $|\psi_\pm\rangle$ 是 $J_z$ 对应于非简并本征值 $\lambda_\pm=\pm\hbar(j_1+j_2)$ 的本征向量. 由于 $J_z$ 和 $\boldsymbol{J}^2$ 对易,我们有

$$J_z|\boldsymbol{J}|^2|\psi_\pm\rangle = |\boldsymbol{J}|^2(J_z|\psi_\pm\rangle) = \lambda_\pm(|\boldsymbol{J}|^2|\psi_\pm\rangle) \tag{14.2.9}$$

由此推出 $|\boldsymbol{J}|^2|\psi_\pm\rangle$ 也是 $J_z$ 对应于同一本征值 $\lambda_\pm$ 的本征向量. 由于 $\lambda_+(\lambda_-)$ 的非简并性, $|J|^2|\psi_+\rangle$ 必须正比于 $|\psi_+\rangle$(类似地, $|J|^2|\psi_-\rangle$ 必须正比于 $|\psi_-\rangle$). 此即 $|J^2||\psi_\pm\rangle\propto|\psi_\pm\rangle$, $|\psi_+\rangle$ 和 $|\psi_-\rangle$ 同样是 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征矢量. 实际上,由于 $|\psi_\pm\rangle$ 对应的都是 $m_1$ 和 $m_2$ 的极端值,我们有

$$(J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})|m_1=j_1, m_2=j_2\rangle = (J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})|m_1=-j_1, m_2=-j_2\rangle \equiv 0 \tag{14.2.10}$$

和

$$\begin{cases} (j_{1z}j_{2z})|m_1=j_1, m_2=j_2\rangle = j_1j_2|m_1=j_1, m_2=j_2\rangle \\ (J_{1z}J_{2z})|m_1=-j_1, m_2=-j_2\rangle = j_1j_2|m_1=-j_1, m_2=-j_2\rangle \end{cases} \tag{14.2.11}$$

这样

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2|\psi_\pm\rangle &= (\boldsymbol{J}_1^2+\boldsymbol{J}_2^2+2J_{1z}J_{2z}+J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})|\psi_\pm\rangle \\ &= \hbar^2[j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2j_1j_2]|\psi_\pm\rangle \\ &= \hbar^2[(j_1+j_2)(j_1+j_2+1)]|\psi_\pm\rangle \end{aligned} \tag{14.2.12}$$

$|\psi_+\rangle$ 和 $|\psi_-\rangle$ 对应于 $\boldsymbol{J}^2$ 的同一本征值 $\hbar^2J(J+1)=\hbar^2(j_1+j_2)(j_1+j_2+1)$.

**14.3** 考虑两个模长都为 $J$ 的角动量. 记 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ 为总角动量,而 $\hat{P}$ 为如下定义的交换算符 $\hat{P}|m_1m_2\rangle=|m_2m_1\rangle$(a)找出 $\hat{P}$ 的本征值;(b)证明 $\hat{P}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 对易:即 $[\hat{P},\boldsymbol{J}]=0$(和 $[\hat{P},|\boldsymbol{J}|^2]=0$);(c)给出 $\hat{P}$ 和 $\boldsymbol{J}^2$ 共同本征态的本征值.

**解答** (a)记 $|\psi\rangle$ 为 $\hat{P}$ 对应于本征值 $\lambda$ 的本征向量;即 $\hat{P}|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$. 这样.

$$(\hat{P})^2|\psi\rangle = \hat{P}\hat{P}|\psi\rangle = \lambda^2|\psi\rangle \tag{14.3.1}$$

将 $|\psi\rangle$ 用(完备的) $|m_1m_2\rangle$ 基展开,得到

---

* 本公式中的简并度的公式应为 $j_1+j_2-|j_1-j_2|$——译者注.

$$|\psi\rangle = \sum_{m_1,m_2}\langle m_1 m_2|\psi\rangle|m_1 m_2\rangle \tag{14.3.2}$$

由 $\hat{P}$的定义,$(\hat{P})^2|m_1 m_2\rangle = |m_1 m_2\rangle$这样

$$(\hat{P})^2|\psi\rangle = \sum_{m_1,m_2}\langle m_1 m_2|\psi\rangle((\hat{P})^2|m_1 m_2\rangle) = |\psi\rangle \tag{14.3.3}$$

比较(14.3.2)和(14.3.3),我们得到 $\lambda^2=1$,$\hat{P}$的本征值 $\lambda=\pm1$.

(b)算符 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ 作用到基右矢

$$|m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \tag{14.3.4}$$

的结果可以写成

$$(\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2)|m_1 m_2\rangle = (\boldsymbol{J}_1|j_1 m_1\rangle)\otimes|j_2 m_2\rangle + |j_1 m_1\rangle\otimes(\boldsymbol{J}_2|j_2 m_2\rangle) \tag{14.3.5}$$

这样

$$\hat{P}\boldsymbol{J}|m_1 m_2\rangle = |j_2 m_2\rangle\otimes(\boldsymbol{J}_2|j_1 m_1\rangle) + (\boldsymbol{J}_1|j_2 m_2\rangle)\otimes|j_1 m_1\rangle \tag{14.3.6}$$

类似地[在(14.3.5)中令 $m_1 \leftrightarrow m_2$],

$$\boldsymbol{J}\hat{P}|m_1 m_2\rangle = \boldsymbol{J}|m_2 m_1\rangle = (\boldsymbol{J}_1|j_2 m_2\rangle)\otimes|j_1 m_1\rangle + |j_2 m_2\rangle\otimes(\boldsymbol{J}_2|j_1 m_1\rangle) \tag{14.3.7}$$

(14.3.6)和(14.3.7)给出相同的结果,由此

$$[\hat{P},\boldsymbol{J}] = 0 \rightarrow [\hat{P},\boldsymbol{J}^2] = 0 \tag{14.3.8}$$

(c)(b)中的结果说明基右矢$|JM\rangle$可以取成$\{\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z;\hat{P}\}$的共同本征态.这等价于$|JM\rangle$在交换算符作用下有给定的宇称(+1).利用(14.3.2)和 CG 系数的对称性,

$$\langle m_2 m_1|JM\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\langle m_2 m_1|JM\rangle \tag{14.3.9}$$

我们得到 $\hat{P}|JM\rangle = \sum_{m_1,m_2}\langle m_1 m_2|JM\rangle(\hat{P}|m_1 m_2\rangle) = \sum_{m_1,m_2}\langle m_1 m_2|JM\rangle|m_2 m_1\rangle$

$$= \sum_{m_1,m_2}\langle m_2 m_1|JM\rangle|m_1 m_2\rangle \tag{14.3.10}$$

在最后一行中交换一下求和指标,得到

$$\hat{P}|JM\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}\sum_{m_1,m_2}\langle m_1 m_2|JM\rangle|m_1 m_2\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J}|JM\rangle \tag{14.3.11}$$

在 $j_1=j_2=j$ 时,$J$ 的取值为$J=0,1,\cdots,2j$,这样的话

$$\hat{P}|JM\rangle = (-1)^{2j-J}|JM\rangle \tag{14.3.12}$$

**14.4** 由两个轨道运动可以忽略的自旋 1/2 粒子构成的系统可由基右矢$|S_1=\frac{1}{2},m_1\rangle\otimes|S_2=\frac{1}{2},m_2\rangle\equiv|m_1 m_2\rangle$描述,其中$|m_1 m_2\rangle$是$\{|\boldsymbol{S}_1|^2,|\boldsymbol{S}_2|^2,S_{1z},S_{2z}\}$的公共本征态.考虑总自旋算符 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$,其分量和模长分别为 $\boldsymbol{S}=(S_x,S_y,S_z)$,$|\boldsymbol{S}|^2=|\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2|^2$.(a)计算 $S_\pm=S_x+iS_y$ 和$S_z$ 作用到态$|m_1 m_2\rangle$上的结果;(b)将$|\boldsymbol{S}|^2=|\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2|^2$ 作用到$|m_1 m_2\rangle$上,计算其结果;(c)用$|m_1 m_2\rangle$的线性组合构造$\{S_1^2,S_2^2 S^2 S_z^2\}$的本征态$|S,m_s\rangle$.找出对应的本征值并验证 $S^2|Sm_s\rangle=\hbar S(S+1)|Sm_s\rangle$和 $S_z|Sm_s\rangle=\hbar m_s|S,m_s\rangle$;(d)讨论$|S,m_s\rangle$在粒子交换 $\hat{P}|m_1 m_2\rangle=|m_2 m_1\rangle$下的对称性.

**解** (a)为了计算 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ 在态$|m_1 m_2\rangle$上的作用,引入记号

$$|m_1=\pm\frac{1}{2},m_2=\pm\frac{1}{2}\rangle = \{|++\rangle,|+-\rangle,|-+\rangle,|--\rangle\}$$

这样

$$\begin{cases} S_1|m_1 m_2\rangle = \dfrac{\hbar}{2}(\sigma_1\otimes\mathbf{1}_2)|m_1 m_2\rangle = \dfrac{\hbar}{2}(\sigma|m_1\rangle)|m_2\rangle \\ S_2|m_1 m_2\rangle = \dfrac{\hbar}{2}(\mathbf{1}_1\otimes\sigma_2)|m_1 m_2\rangle = \dfrac{\hbar}{2}|m_1\rangle(\sigma|m_2\rangle) \end{cases} \tag{14.4.1}$$

此处(1)和 $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x\sigma_y\sigma_z)$ 为单粒子自旋算符,分别对应于 2×2 单位矩阵和 3 个 Pauli 矩阵.满足下列等式:

$$
\begin{aligned}
&\sigma_z|+\rangle=|+\rangle,\sigma_z|-\rangle=-|-\rangle,\sigma_+|-\rangle=2|+\rangle,\sigma_-|+\rangle=2|-\rangle\\
&\sigma_+|+\rangle=0,\sigma_-|-\rangle=0 \qquad (\sigma_\pm\equiv\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y,\sigma^2=3)
\end{aligned}
\tag{14.4.2}
$$

总自旋算符 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ 的形式为 $S=\frac{\hbar}{2}(\sigma_1\otimes\mathbf{1}_2+\mathbf{1}_1\otimes\sigma_2)$由此导出

$$
\begin{aligned}
\text{I}\quad &\begin{cases}S_z=\frac{\hbar}{2}(\sigma_{1z}\otimes\mathbf{1}_2+\mathbf{1}_1\otimes\sigma_{2z})\\ \\ S_\pm=\frac{\hbar}{2}(\sigma_{1\pm}\otimes\mathbf{1}_2+\mathbf{1}_1\otimes\sigma_{2\pm})\end{cases}\\
\text{II}\quad &
\end{aligned}
\tag{14.4.3}
$$

利用(14.4.3I)和(14.4.2)

$$
\begin{cases}
S_z|++\rangle=\hbar|++\rangle\\
S_z|+-\rangle=S_z|-+\rangle=0\\
S_z|--\rangle=-\hbar|--\rangle
\end{cases}
\tag{14.4.4}
$$

应用(14.4.3II)和(14.4.2),得到

$$
\begin{cases}
S_+|--\rangle=S_-|++\rangle=\hbar(|+-\rangle+|-+\rangle)\\
S_+|+-\rangle=S_+|-+\rangle=\hbar|++\rangle\\
S_-|+-\rangle=S_-|-+\rangle=\hbar|--\rangle\\
S_+|++\rangle=S_-|--\rangle=0
\end{cases}
\tag{14.4.5}
$$

(b)应用(a)中的记号,算符$|\boldsymbol{S}|^2=|\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2|^2$ 等于

$$
S^2=\frac{\hbar^2}{4}(6+2\sigma_{1z}\otimes\sigma_{2z}+\sigma_{1+}\otimes\sigma_{2-}+\sigma_{1-}\otimes\sigma_{2+})
\tag{14.4.6}
$$

在这里应用了等式 $S_{1x}S_{2x}+S_{1y}S_{2y}=\frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+})$和 $\sigma^2=(3)\mathbf{1}$;由(14.4.2)和(14.4.6),我们有

$$
\begin{cases}
S^2|++\rangle=\frac{\hbar^2}{4}(6+2)|++\rangle=2\hbar^2|++\rangle\\
S^2|+-\rangle=\frac{\hbar^2}{4}[(6-2)|+-\rangle+4|-+\rangle]=\hbar^2(|+-\rangle+|-+\rangle)\\
S^2|-+\rangle=S^2|+-\rangle\\
S^2|--\rangle=\frac{\hbar^2}{4}(6-2)|--\rangle=2\hbar^2|--\rangle
\end{cases}
\tag{14.4.7}
$$

(c)应用等式(14.4.4)和(14.4.7)及题 14.2 的结果,我们有

$$
\begin{aligned}
&S^2|++\rangle=2\hbar^2|++\rangle,S_z|++\rangle=\hbar|++\rangle\\
&S^2|--\rangle=2\hbar^2|--\rangle,S_z|--\rangle=-\hbar|--\rangle
\end{aligned}
\tag{14.4.8}
$$

还有

$$
\begin{cases}
S^2(|+-\rangle+|-+\rangle)=2\hbar^2(|+-\rangle+|-+\rangle)\\
S^2(|+-\rangle-|-+\rangle)=0
\end{cases}
\tag{14.4.9}
$$

和

$$
S_z(|+-\rangle+|-+\rangle)=S_z(|+-\rangle-|-+\rangle)=0
\tag{14.4.10}
$$

忽略无关紧要的整体相因子,我们有

$$\left.\begin{array}{l}|S=1,m_s=1\rangle=|++\rangle\\ |S=1,m_s=0\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle)\\ |S=1,m_s=-1\rangle=|--\rangle\end{array}\right\}\begin{array}{l}S=1\\ \text{三重态}\end{array}$$

$$|S=0,m_s=0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle-|-+\rangle)\Big\}\begin{array}{l}S=0\\ \text{单态}\end{array} \tag{14.4.11}$$

这里态$|S,m_s\rangle$正交且满足

$$\begin{array}{ll}S^2|Sm_s\rangle=\hbar^2S(S+1)|Sm_s\rangle, & S=1,0\\ S_z|Sm_s\rangle=\hbar m_s|Sm_s\rangle, & m_s=1,0,-1\end{array} \tag{14.4.12}$$

(d)态$|S,m_s\rangle$在交换$m_1\leftrightarrow m_2$作用下的对称性可由(14.4.11)得到.通过直接观察,在交换运算下$S=1$的三重态不变,而$S=0$的单态变号.即

$$\begin{cases}\hat{P}|\text{三重态}\rangle=|\text{三重态}\rangle\\ \hat{P}|\text{单态}\rangle=|\text{单态}\rangle\end{cases} \tag{14.4.13}$$

这里$\hat{P}$是交换算符:$\hat{P}|m_1m_2\rangle=|m_2m_1\rangle$.

注:(14.4.13)也可由(14.3.12)得到,只需令$2j\to1$和$J\leftrightarrow S=0,1$即可.

**14.5　设$S=S_1+S_2$是两个自旋为1/2($S_1=S_2=1/2$)的粒子的总角动量.通过将升降算符$S_\pm=S_x\pm iS_y$作用到$|S,m_s\rangle$上的方法来计算CG系数$\langle m_1m_2|Sm_s\rangle$.将两个子空间$S=0$和$S=1$分开计算.**

**解答**　为了给出$S_1=S_2=1/2$时的CG系数,应用下列关系[见等式(14.12)]:

$$\begin{array}{ll}\text{I} & S_\pm|Sm_s\rangle=\hbar\sqrt{S(S+1)-m_s(m_s\pm1)}|S,m_s\pm1\rangle\\ \text{II} & S_{1\pm}|m_1m_2\rangle=\hbar\sqrt{S_1(S_1+1)-m_1(m_1\pm1)}|m_1\pm1,m_2\rangle\\ \text{III} & S_{2\pm}|m_1m_2\rangle=\hbar\sqrt{S_2(S_2+1)-m_2(m_2\pm1)}|m_1,m_2\pm1\rangle\end{array} \tag{14.5.1}$$

利用相位条件

$$|S=S_1+S_2,m_s=\pm(S_1+S_2)\rangle=|m_1=\pm S_1,m_2=\pm S_2\rangle \tag{14.5.2}$$

注:状态$|S=S_1+S_2,m_s=\pm(S_1+S_2)\rangle$是$S^2$和$S_z$分别对应于非简并本征值$\lambda_\pm=\pm\hbar(S_1+S_2)$的本征态(见题14.2),这样就有

$$|S=S_1+S_2,m_s=\pm(S_1+S_2)\rangle=e^{i\phi}|m_1=\pm S_1,m_2=\pm S_2\rangle$$

其中相位$\phi$可取为0.

1. 子空间$S=1$:我们立即得到

$$|1,1\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=|++\rangle \tag{14.5.3}$$

将(14.5.3)用$S_-=S_{1-}+S_{2-}$作用并应用(14.5.1),得到

$$\begin{cases}S_-|1,1\rangle=\hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}|1,0\rangle=\hbar\sqrt{2}|1,0\rangle\\ S_-|1,1\rangle=(S_{1-}+S_{2-})\left|\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle=\hbar\sqrt{1}\left|-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle+\hbar\sqrt{1}\left|\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2}\right\rangle\end{cases} \tag{14.5.4}$$

由此

$$|1,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle,+\left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle) \tag{14.5.5}$$

类似地把$S_-$作用到$|1,0\rangle$态上,

$$\begin{cases} S_-|1,0\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1)-0(0-1)}|1,-1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1,-1\rangle \\ S_-|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}S_{1-}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right)+\frac{1}{\sqrt{2}}S_{2-}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right) \\ \quad = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(\left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right)=\frac{2}{\sqrt{2}}\left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \end{cases} \tag{14.5.6}$$

与(14.5.2)相合

$$|1,-1\rangle = \left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = |--\rangle \tag{14.5.7}$$

2. 子空间 $S=0$：由 $m_s=m_1+m_2$(此处 $m_s=0$)，我们有

$$|0,0\rangle = \alpha\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\beta\left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \tag{14.5.8}$$

利用 $|S,m_s\rangle$ 的正交性，得到

$$\langle 1,0|0,0\rangle = 0 \to \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta)=0 \to \beta=-\alpha$$

$$\langle 0,0|0,0\rangle = 1 \to |\alpha|^2+|\beta|^2 = 1 \to 2|\alpha|^2 = 1 \to \alpha = 1/\sqrt{2}$$

最后我们得到

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right) \tag{14.5.9}$$ *

**14.6**　设 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ 是两个自旋为1的粒子的总角动量.(a)在 $S=2$ 的子空间里将右矢 $|Sm_s\rangle$ 表示成 $|S_1m_1\rangle\otimes|S_2m_2\rangle=|m_1\rangle|m_2\rangle$ 的线性组合；(b)对于 $S=1$ 的子空间，重复(a)的工作；(c)对于 $S=1$ 的子空间，重复(a)的工作.

**解答**　(a)对于 $S=2, m_s=2(m_s=m_1+m_2)$，我们立即得到

$$|2,2\rangle = |1\rangle|1\rangle \tag{14.6.1}$$

将 $S_-=S_{1-}+S_{2-}$ 作用到(14.6.1)两边，得到

$$\begin{cases} S_-|2,2\rangle = \hbar\sqrt{2(2+1)-2(2-1)}|2,1\rangle \\ S_-|1\rangle|1\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1)}(|0\rangle|1\rangle+|1\rangle|0\rangle) \end{cases} \tag{14.6.2}$$

由此得到

$$|2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle+|1\rangle|0\rangle) \tag{14.6.3}$$

将 $S_-=S_{1-}+S_{2-}$ 再作用到(14.6.3)两边，得到

$$\begin{cases} S_-|2,1\rangle = \hbar\sqrt{2(2+1)}|2,0\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}S_-(|0\rangle|1\rangle+|1\rangle|0\rangle) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}[\sqrt{2}(|-1\rangle|1\rangle+|0\rangle|0\rangle+|0\rangle|0\rangle+|1\rangle|-1\rangle)] \end{cases} \tag{14.6.4}$$

由此

---

* 本题用来计算 S=0 的 CG 系数的方法是直接构造 $S=0$ 的状态，这个方法甚至可以推广到一般的多个角动量的耦合问题中去！这种方法是一种值得在教科书中大力推广的基本的方法，特别适用于手算，比利用 CG 系数的一般公式不知要节省多少工作量.但是这种方法也有一个小小的缺陷，就是在构造状态时有一个不确定的相因子.个人对相因子有不同的取法，这样就很难统一了.目前 CG 系数的相因子多半取 Conton-Shortle 约定，各种关于 CG 系数的数据库也遵从此约定.如果能在手算 CG 系数时注意遵循这一规定就更好了——译者注.

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[|-1\rangle|1\rangle + 2|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|-1\rangle] \tag{14.6.5}$$

依此类推,我们得到

$$|2,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|0\rangle) \tag{14.6.6}$$

最后有

$$|2,-2\rangle = |-1\rangle|-1\rangle \tag{14.6.7}$$

注:很显然也可以把(14.6.7)作为基本出发点来用升算符 $S_+ = S_{1+} + S_{2+}$ 来构造状态 $|2,M\rangle$.

(b)对于 $S=1$, $|1,1\rangle$可写成

$$|1,1\rangle = \alpha|1\rangle|0\rangle + \beta|0\rangle|1\rangle \tag{14.6.8}$$

其中 $\alpha$ 和 $\beta$ 由正交关系确定.即

$$\begin{aligned} &\langle 2,1|1,1\rangle = 0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta) = 0 \rightarrow \beta = -\alpha \\ &\langle 1,1|1,1\rangle = 1 \rightarrow |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \rightarrow 2|\alpha|^2 = 1 \end{aligned} \tag{14.6.9}$$

由此导出

$$|1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle) \tag{14.6.10}$$

由

$$\begin{cases} S_-|1,1\rangle = \hbar\sqrt{1(1+1)}|1,0\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}S_-(|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{2}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|-1\rangle - |0\rangle|0\rangle - |-1\rangle|1\rangle) \end{cases} \tag{14.6.11}$$

得到

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|-1\rangle - |-1\rangle|1\rangle) \tag{14.6.12}$$

重复上面的过程,我们有

$$|1,-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle|0\rangle - |0\rangle|-1\rangle) \tag{14.6.13}$$

(c)子空间 $S=0$ 的惟一一个状态可写成

$$|0\rangle|0\rangle = \gamma|1\rangle|-1\rangle + \delta|-1\rangle|1\rangle + \rho|0\rangle|0\rangle \tag{14.6.14}$$

此处 $\gamma$、$\delta$ 和 $\rho$ 由正交性关系确定:

$$\left.\begin{aligned} \langle 2,0|0,0\rangle = 0 \\ \langle 1,0|0,0\rangle = 0 \\ \langle 0,0|0,0\rangle = 1 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \gamma = \frac{1}{\sqrt{3}},\ \delta = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ \rho = \frac{1}{3} \tag{14.6.15}$$

由此

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle|-1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |-1\rangle|1\rangle) \tag{14.6.16}$$

注:$S=0,2$ 的状态在粒子交换下是对称的,而 $S=1$ 是反对称的.

**14.7** 一个系统由 $j_1=1$ 和 $j_2=1/2$ 的两个角动量对应的状态 $|j_1=1,m_1\rangle \otimes |j_2=\frac{1}{2},m_2\rangle$ 构成.系统处于 $|JM\rangle$态,其中 $\boldsymbol{J}$ 是总角动量而 $M$ 是 $\boldsymbol{J}$ 的 $z$ 分量.考虑特殊的状态(a) $|J=$

$\frac{3}{2},M=\frac{3}{2}\rangle$;(b) $|J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle$. 对于每一个态计算取得观测值$(m_1,m_2)$的概率和$j_{2z}$、$j_{2z}$的平均值;(c)计算 $j_y$ 在态$|J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle$中的平均值.

**解**　(a)$(m_1,m_2)$的可能值为

$$\begin{cases} j_1=1\to m_1=1,0,-1 \\ j_2=\frac{1}{2}\to m_2=\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \end{cases} \tag{14.7.1}$$

$(J,M)$的可能值为

$$\begin{cases} J=\frac{3}{2}\to M=\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2} \\ J=\frac{1}{2}\to M=\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \end{cases} \tag{14.7.2}$$

对于$|J=\frac{3}{2},M=\frac{3}{2}\rangle$,我们有

$$|J=\frac{3}{2},M=\frac{3}{2}\rangle=|j_1=1,m_1=1\rangle|j_2=\frac{1}{2},m_2=\frac{1}{2}\rangle \tag{14.7.3}$$

由此

$$\begin{cases} \text{prob}\left(m_1=1,\quad m_2=\frac{1}{2}\right)=\left|\langle m_1=1,m_2=1/2|J=\frac{3}{2},M=\frac{3}{2}\rangle\right|^2=1 \\ \text{prob}\left(m_1\neq 1,\quad m_2\neq\frac{1}{2}\right)=0 \end{cases} \tag{14.7.4}$$

$j_{1z}$和$j_{2z}$的平均值为

$$\begin{aligned} \langle JM|J_{1z}|JM\rangle &= \hbar m_1 \\ \langle JM|J_{2z}|JM\rangle &= \hbar m_2 \end{aligned} \tag{14.7.5}$$

对于 $m_1=1$ 和 $m_2=1/2$ 我们得到

$$\langle J_{1z}\rangle=\hbar,\ \langle J_{2z}\rangle=\hbar/2 \tag{14.7.6}$$

(b)首先我们先将态$|J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle$写成$|m_1,m_2\rangle$的线性组合.由(14.7.3)得到

$$\begin{cases} J_-|J=\frac{3}{2},M=\frac{3}{2}\rangle=\hbar\sqrt{\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)-\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}-1\right)}|J=\frac{3}{2},M=\frac{1}{2}\rangle \\ J_-|m_1=1,m_2=\frac{1}{2}\rangle=\hbar\sqrt{1(1+1)}|m_1=0,m_2=\frac{1}{2}\rangle \\ +\hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)+\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}|m_1=1,m_2=-\frac{1}{2}\rangle \end{cases} \tag{14.7.7}$$

由此

$$|J=\frac{3}{2},M=\frac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|m_1=0,m_2=\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|m_1=1,m_2=-\frac{1}{2}\rangle \tag{14.7.8}$$

由于正交性

$$|J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}|m_1=0,m_2=\frac{1}{2}\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}|m_1=1,m_2=-\frac{1}{2}\rangle \tag{14.7.9}$$

这样

$$\begin{cases}\text{prob}\left(m_1=0,m_2=\frac{1}{2}\right)=\left|\langle m_1=0,m_2=\frac{1}{2}\,|\,J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle\right|^2=\frac{1}{3}\\ \text{prob}\left(m_1=1,m_2=-\frac{1}{2}\right)=\left|\langle m_1=1,m_2=-\frac{1}{2}\,|\,J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle\right|^2=\frac{2}{3}\end{cases} \tag{14.7.10}$$

对于其他的$(m_1,m_2)$，$P(m_1,m_2)=0$. $j_{2z}$和$j_{2z}$在态$|J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle$中的平均值由(14.7.5)和(14.7.10)给出.将(14.7.9)代入(14.7.5)，我们得到

$$\begin{cases}\langle J_{1z}\rangle=\frac{1}{3}(m_1=0)\hbar+\frac{2}{3}(m_1=1)\hbar=\frac{2}{3}\hbar\\ \langle J_{2z}\rangle=\frac{1}{3}\left(m_2=\frac{1}{2}\right)\hbar+\frac{2}{3}\left(m_2=-\frac{1}{2}\right)\hbar=-\frac{1}{6}\hbar\end{cases} \tag{14.7.11}$$

(b)算符 $j_y$ 能写成下式：

$$J_y=\frac{1}{2i}(J_+-J_-) \tag{14.7.12}$$

这样

$$\langle JM|J_y|JM\rangle=\frac{\hbar}{2i}\langle JM|\left(\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,|J,M+1\rangle\right.$$
$$\left.+\sqrt{JJ+1-MM-1}\,|J,M-1\rangle\right)=0 \tag{14.7.13}$$

或者对于$|J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle$，我们利用著名的自旋1/2表示(见第七章)

$$|J=\frac{1}{2},M=\frac{1}{2}\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\quad |J=\frac{1}{2},M=-\frac{1}{2}\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\quad J_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix} \tag{14.7.14}$$

这导致

$$\langle J_y\rangle=(1\,0)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0 \tag{14.7.15}$$

与(14.7.13)吻合.

**14.8** 考虑一个由忽略轨道运动的自旋1/2粒子构成的系统.系统的哈密顿算符为$H=\varepsilon_1\sigma_{1z}+\varepsilon_2\sigma_{2z}$，其中$\varepsilon_1$和$\varepsilon_2$是实常数，$\sigma_{1z}$和$\sigma_{2z}$分别是两个粒子的自旋算符$\boldsymbol{S}_1=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_1$和$\boldsymbol{S}_2=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$在$z$轴方向的投影.(a)设系统$t=0$时的初态为$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle)$，在$t$时刻观测$\boldsymbol{S}^2=(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2$，它的可能取值和相应的概率是什么？(b)如果初态任意，在$\langle S^2\rangle$的计算中出现的玻尔频率是什么？(c)对于$S_z=S_{1z}+S_{2z}$，重复(a)和(b)的工作.

**解答** (a)$\boldsymbol{S}^2=(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2$(和$S_z$)的本征态对应于$S=1,0$的分别是三重态和单态.这样，$\boldsymbol{S}^2$的观测值为

$$\begin{matrix}\text{I}\\ \text{II}\end{matrix}\begin{cases}S=1\to2\hbar^2\\ S=0\to0\end{cases} \tag{14.8.1}$$

但是状态$|S,m_s\rangle$不是哈密顿算符的本征态，这样概率prob$(S=0)$和prob$(S=1)$将随时间变化.系统的定态是

$$|m_1=\pm\frac{1}{2},m_2=\pm\frac{1}{2}\rangle=\{|++\rangle,|+-\rangle,|-+\rangle,|--\rangle\} \tag{14.8.2}$$

其能级为

$$H|-\rangle = (\varepsilon_1\sigma_{1z} + \varepsilon_2\sigma_{2z})|-\rangle = (\pm\varepsilon_1 \pm \varepsilon_2)|-\rangle \tag{14.8.3}$$

代入系统初态的表达式中

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) = |S=1, m_s=0\rangle \tag{14.8.4}$$

得到

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\exp[-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar]|+-\rangle + \exp[i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar]|-+\rangle\} \tag{14.8.5}$$

将(14.8.5)写成下式:

$$\begin{cases} |+-\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,0\rangle) \\ |-+\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle - |0,0\rangle) \end{cases} \tag{14.8.6}$$

将(14.8.6)代入(14.8.5),我们得到

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t}{\hbar}|1,0\rangle - i\sin\frac{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t}{\hbar}|0,0\rangle \tag{14.8.7}$$

prob($S=1$)和 prob($S=0$)分别是

$$\begin{array}{ll} \text{I} & \begin{cases} \text{prob}(S=1) = \left|\sum\limits_{m_s=1,0,-1}\langle S=1, m_s|\psi(t)\rangle\right|^2 = \cos^2\dfrac{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t}{\hbar} \\ \text{prob}(S=0) = |\langle S=0, m_s=0|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\dfrac{(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t}{\hbar} \end{cases} \\ \text{II} & \end{array} \tag{14.8.8}$$

$S^2$ 的平均值为

$$\begin{aligned} \langle\psi(t)|S^2|\psi(t)\rangle &= 2\hbar^2\cdot\text{prob}(S=1) + 0\cdot\text{prob}(S=0) \\ &= 2\hbar^2\cos^2[(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar] = \hbar^2[1+\cos(\omega_B t)] \end{aligned} \tag{14.8.9}$$

其中 $\omega_B = 2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)/\hbar$ 是 Bohr 频率.注意表达式(14.8.6)和(14.8.7)是 $m_s=0$ 的$|S,m_s\rangle$态的线性组合,从(14.8.3)和(14.8.4)中我们得知 $S_z = S_{1z}+S_{2z}$ 与哈密顿算符对易,且有 $S_z|\psi(0)\rangle = 0$.这样

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)|1,0\rangle + C_2(t)|0,0\rangle \tag{14.8.10}$$

其中 $C_1(t)$和 $C_2(t)$分别是时间相关的系数.这样我们有

$$\begin{cases} \text{prob}(S=1) = |\langle S=1, m_s=0|\psi(t)\rangle|^2 = |C_1(t)|^2 \\ \text{prob}(S=0) = |\langle S=0, m_s=0|\psi(t)\rangle|^2 = |C_2(t)|^2 \end{cases} \tag{14.8.11}$$

这样(14.8.8I)的求和中就只剩下了一项($m_s=0$).

(c)考虑如下形式的初态

$$|\psi(0)\rangle = \alpha|++\rangle + \beta|+-\rangle + \gamma|-+\rangle + \delta|--\rangle \tag{14.8.12}$$

这里 $\alpha$、$\beta$、$\gamma$ 和 $\delta$ 是复常数.$|\psi(t)\rangle$的时间演化规律为

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t/\hbar}|++\rangle + \beta e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar}|+-\rangle + \gamma e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar}|-+\rangle + \delta e^{i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t/\hbar}|--\rangle \tag{14.8.13}$$

利用(14.8.6),我们得到

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \alpha e^{-i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t/\hbar}|1,1\rangle + \delta e^{i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t/\hbar}|1,-1\rangle \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar} + \gamma e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar})|1,0\rangle \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar} - \gamma e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar})|0,0\rangle \end{aligned} \tag{14.8.14}$$

$S^2$ 的平均值为

$$\langle\psi(t)|S^2|\psi(t)\rangle = 2\hbar^2\left\{|\alpha|^2+|\delta|^2+\frac{1}{2}(|\beta|^2+|\gamma|^2)+\mathrm{Re}[\beta^*\gamma e^{2i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar}]\right\} \tag{14.8.15}$$

$\langle S^2\rangle$ 由玻尔频率 $\omega_B=2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)/\hbar$ 给出，它与我们在(a)中得到的结果相同.

注：在 $\alpha=\delta=0,\beta=\gamma=\sqrt{2}$ 时，(14.8.15)成为

$$\langle\psi(t)|S^2|\psi(t)\rangle = \hbar^2\left[1+\cos\left(\frac{2(\varepsilon_1-\varepsilon_2)}{\hbar}t\right)\right] \tag{14.8.16}$$

与(14.8.9)相合.

(c)为计算 $S_x$ 的平均值，我们回到(14.8.13)并计算右矢 $(S_{1x}+S_{2x})|\psi(t)\rangle$，这给出

$$S_x|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\{[\alpha e^{-i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t/\hbar}+\delta e^{i(\varepsilon_1+\varepsilon_2)t/\hbar}](|+-\rangle+|-+\rangle)$$
$$+[\beta e^{-i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar}+\gamma e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)t/\hbar}](|++\rangle+|--\rangle)\} \tag{14.8.17}$$

这样

$$\langle\psi(t)|S_x|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\{\alpha^*\beta e^{2i\varepsilon_2 t/\hbar}+\alpha^*\gamma e^{2i\varepsilon_1 t/\hbar}+\delta^*\beta e^{-2i\varepsilon_1 t/\hbar}+\delta^*\gamma e^{-2i\varepsilon_2 t/\hbar}$$
$$+\beta\alpha^* e^{-2i\varepsilon_2 t/\hbar}+\beta^*\delta e^{2i\varepsilon_1 t/\hbar}+\gamma^*\alpha e^{-2i\varepsilon_1 t/\hbar}+\gamma^*\delta e^{-2i\varepsilon_2 t/\hbar}\}$$
$$=\hbar\mathrm{Re}\{(\alpha^*\beta+\gamma^*\delta)e^{2i\varepsilon_2 t/\hbar}+(\alpha^*\gamma+\beta^*\delta)e^{2i\varepsilon_1 t/\hbar}\} \tag{14.8.18}$$

此时 $\langle S_x\rangle$ 演化的玻尔频率为 $\omega_{B1}=2\varepsilon_1/\hbar$ 和 $\omega_{B_2}=2\varepsilon_2/\hbar$.

**14.9** 自旋为1/2的粒子的总角动量为 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$，其中 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 分别是轨道角动量和自旋角动量($l$ 是整数而 $S=1/2$). 设 $|l,m_l\rangle\otimes|S=\frac{1}{2}m_s\rangle\equiv|m_l m_s\rangle$ 是 $\{|\boldsymbol{L}|^2|\boldsymbol{S}|^2,L_z,S_z\}$ 的本征态，$|J,M\rangle$ 是 $\{J^2 J_z\}$ 的本征态. 通过将 $J_\pm=L_\pm+S_\pm$ 次第作用到右矢 $|J,M\rangle$ 上的方法来构造CG系数 $\langle m_l m_s|JM\rangle$. 对于 $J=l+1/2$ 和 $J=l-1/2$ 的两个子空间分别进行计算.

**解答** 首先我们看出如果 $l=0$，右矢 $|m_l=0,m_s=\pm\frac{1}{2}\rangle$ 是 $\{|\boldsymbol{J}|^2,J_z\}$ 的本征态. 此时 $J=S=1/2,M=m_s=\pm 1/2$. 由此

$$|J=1/2,M=1/2\rangle=|m_l=0,m_s=\pm 1/2\rangle\equiv|m=0,\pm\rangle \tag{14.9.1}$$

非零的CG系数只有 $\langle 0,+|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\rangle=\langle 0,-|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle=1$ 另一方面，对于 $l\neq 0$，有两种可能的耦合

$$\begin{matrix}\mathrm{I}\\ \mathrm{II}\end{matrix}\begin{cases}J=l+\frac{1}{2} & M=l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2},\cdots,-\left(l+\frac{1}{2}\right)\\ J=l-\frac{1}{2} & M=l-\frac{1}{2},l-\frac{3}{2},\cdots,-\left(l-\frac{1}{2}\right)\end{cases} \tag{14.9.2}$$

在($l\neq 0$)时，我们分别处理 $J=l+1/2$ 和 $J=l-1/2$ 对应的子空间，并企图证明

$$\begin{matrix}\mathrm{I}\\ \mathrm{II}\end{matrix}\begin{cases}|J=l+\frac{1}{2},M\rangle=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+M+\frac{1}{2}}|m=M-\frac{1}{2},+\rangle+\sqrt{l-M+\frac{1}{2}}|m=M+\frac{1}{2},-\rangle\right]\\ |J=l-\frac{1}{2},M\rangle=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+M+\frac{1}{2}}|m=M+\frac{1}{2},-\rangle-\sqrt{l-M+\frac{1}{2}}|m=M-\frac{1}{2},+\rangle\right]\end{cases} \tag{14.9.3}$$

这里 $|m_l m_s\rangle\equiv|m_\pm\rangle$，$M=m_l+m_s=m\pm 1/2$.

1. $J=l+1/2$：子空间 $J=l+1/2$ 对应的子空间有 $2l+1$ 个线性无关的本征态. 与通常一样(见题14.2)，$M_{max}=l+1/2$ 是非简并的，于是

$$|J=l+\frac{1}{2},M=l+\frac{1}{2}\rangle=|m=l,+\rangle \tag{14.9.4}$$

用$J_-=L_-+S_-$作用于(14.9.4),得到

$$\begin{cases} J_-|l+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}\rangle=\hbar\sqrt{(J+M)(J-M+1)}|l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\rangle=\hbar\sqrt{2l+1}\,|l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}\rangle \\ J_-|l,+\rangle=(L_-+S_-)|l,+\rangle=\hbar(\sqrt{2l}|l-1,+\rangle+|l,-\rangle) \end{cases} \tag{14.9.5}$$

这样,对应于(14.9.3I),我们有

$$|J=l+\frac{1}{2},M=l-\frac{1}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}[\sqrt{2l}|l-1,+\rangle+|l,-\rangle] \tag{14.9.6}$$

根据数学归纳法假定下式成立:

$$\text{I}\quad J_-|l+\frac{1}{2},M\rangle=\hbar\sqrt{\left(l+M+\frac{1}{2}\right)\left(l-M+\frac{3}{2}\right)}|l+\frac{1}{2},M-1\rangle$$

$$\text{II}\quad\begin{cases} J_-|M-\frac{1}{2},+\rangle=\hbar\sqrt{\left(l+M+\frac{1}{2}\right)\left(l-M+\frac{3}{2}\right)}|M-\frac{3}{2},+\rangle+\hbar|M-\frac{1}{2},-\rangle \\ J_-|M+\frac{1}{2},-\rangle=\hbar\sqrt{\left(l+M+\frac{1}{2}\right)\left(l-M+\frac{3}{2}\right)}|M-\frac{1}{2},-\rangle \end{cases}$$

$$\tag{14.9.7}$$

这样用$J_-=L_-+S_-$作用于(14.9.7I)中可得到

$$\begin{aligned} |l+\frac{1}{2},M-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left\{\frac{\sqrt{\left(l+M+\frac{1}{2}\right)\left(l+M-\frac{1}{2}\right)\left(l-M+\frac{3}{2}\right)}}{\sqrt{\left(l+M+\frac{1}{2}\right)\left(l-M+\frac{3}{2}\right)}}|M-\frac{3}{2},+\rangle\right. \\ &\quad\left.+\frac{\sqrt{l+M+\frac{1}{2}}\left(1+l-M+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{\left(l+M+\frac{1}{2}\right)\left(l-M+\frac{3}{2}\right)}}|M-\frac{1}{2},-\rangle\right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+M-\frac{1}{2}}|M-\frac{3}{2},+\rangle+\sqrt{l-M+\frac{3}{2}}|M-\frac{1}{2},-\rangle\right] \end{aligned} \tag{14.9.8}$$

这说明(14.9.7I)的假设对于一般的$M$都成立.

2. $J=l-1/2$:状态$|J=l-\frac{1}{2},M=l-\frac{1}{2}\rangle$是$|l-\rangle$和$|l-1,+\rangle$的线性组合.由(14.9.6)我们注意到这是能得到$m_l+m_s=1-1/2$的惟一选择.由此

$$|J=l-\frac{1}{2},M=l-\frac{1}{2}\rangle=\alpha|l-1,+\rangle+\beta|l,-\rangle \tag{14.9.9}$$

这个状态必须正交于(14.9.6),这样$\alpha=\frac{\sqrt{2l}}{\sqrt{2l+1}},\beta=-\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$

$$|J=l-\frac{1}{2},M=l-\frac{1}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}[\sqrt{2l}|l,-\rangle-|l-1,+\rangle] \tag{14.9.10}$$

将$J_-=L_-+\Omega$作用于(14.9.10)并计算所有的系数.通过与$J=1+1/2$类似地计算,我们得到

$$|l-\frac{1}{2},M-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+M-\frac{1}{2}}|M-\frac{1}{2},-\rangle-\sqrt{l-M-\frac{1}{2}}|M-\frac{3}{2},+\rangle\right] \tag{14.9.11}$$

这个结果与(14.9.3II)相同.

**14.10** 两个自旋1/2的粒子(忽略轨道运动)构成的系统的未微扰哈密顿算符$H_0=-A(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$.我们在其中加上一个微扰$H_1=\varepsilon(\sigma_{1x}\sigma_{1x}+\sigma_{2y}\sigma_{2y})$,其中$\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$是泡利矩阵,

$\varepsilon \ll A$ 是正常数.(a)给出 $H_0$ 的本征值和本征向量;(b)(严格)计算总哈密顿算符 $H=H_0+H_1$ 的能级和本征向量;(c)利用微扰论,计算 $H_0$ 能级的一阶修正,并与(b)中的严格结果对照.

**解** (a)两个自旋为 1/2 的粒子由非耦合基 $|m_1=\pm\frac{1}{2},m_2=\pm\frac{1}{2}\rangle=\{|++\rangle,|+-\rangle,|-+\rangle,|--\rangle\}$ 描述.由于 $H_0=\frac{-2}{\hbar}A(S_{1z}+S_{2z})$ 我们有

$$\begin{cases}H_0|++\rangle=-2A|++\rangle\\ H_0|+-\rangle=H_0|-+\rangle=0\\ H_0|--\rangle=2A|--\rangle\end{cases} \tag{14.10.1}$$

$H_0$ 的本征值为 $-2A$、0 和 $2A$.

(b)总哈密顿算符 $H_0+H_1$ 可写成

$$H=-A(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})+\frac{\varepsilon}{2}[(\sigma_1+\sigma_2)^2-\sigma_1^2-\sigma_2^2-2\sigma_{1z}\sigma_{2z}] \tag{14.10.2}$$

$H$ 与算符 $\{S_1^2,S_2^2,S^2,S_z\}$ 对易,其中 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ 是粒子的总自旋.这样,总哈密顿算符的本征态为以下的三重态和单态:

$$\text{I}\begin{cases}|1,1\rangle=|++\rangle\\ |1,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle)\\ |1,-1\rangle=|--\rangle\end{cases} \tag{14.10.3}$$

$$\text{II}\quad |0,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle-|-+\rangle)$$

相应的能级为

$$\begin{cases}H|1,1\rangle=(-2A+4\varepsilon-3\varepsilon-\varepsilon)|1,1\rangle=-2A|1,1\rangle\\ H|1,0\rangle=(0+4\varepsilon-3\varepsilon+\varepsilon)|1,0\rangle=2\varepsilon|1,0\rangle\\ H|1,-1\rangle=(2A+4\varepsilon-3\varepsilon-\varepsilon)|1,-1\rangle=2A|1,-1\rangle\end{cases} \tag{14.10.4}$$

和

$$H|0,0\rangle=(0+0-3\varepsilon+\varepsilon)|0,0\rangle=-2\varepsilon|0,0\rangle \tag{14.10.5}$$

(c)$H_1=\frac{\varepsilon}{2}(\sigma_{1+}\sigma_{2-}+\sigma_{1-}\sigma_{2+})$ 在非微扰基 $\{|++\rangle,|+-\rangle,|-+\rangle,|--\rangle\}$ 下的矩阵元由下面的矩阵给出

$$\begin{array}{c|cccc} & |++\rangle & |+-\rangle & |-+\rangle & |--\rangle\\ \hline |++\rangle & 0 & 0 & 0 & 0\\ |+-\rangle & 0 & 0 & 2\varepsilon & 0\\ |-+\rangle & 0 & 2\varepsilon & 0 & 0\\ |--\rangle & 0 & 0 & 0 & 0\end{array} \tag{14.10.6}$$

未微扰能级为 $\varepsilon_1=-2A,\varepsilon_2=\varepsilon_3=0$ 和 $\varepsilon_4=2A$.这样

$$\begin{cases}\Delta\varepsilon_1=\langle++|H_1|++\rangle=0\\ \Delta\varepsilon_4=\langle--|H_1|--\rangle=0\end{cases} \tag{14.10.7}$$

其中 $\varepsilon_1$ 和 $\varepsilon_4$ 是非简并能级.对于简并的本征值 0,考虑行列式

$$\det(H_1-\lambda I)=\begin{vmatrix}-\lambda & 2\varepsilon\\ 2\varepsilon & -\lambda\end{vmatrix}=\lambda^2-4\varepsilon^2 \tag{14.10.8}$$

得

$$\Delta\varepsilon_{2,3} = \pm 2\varepsilon \tag{14.10.9}$$

由方程(14.10.7)和(14.10.9)导出

$$\begin{cases} E_1 = \varepsilon_1 + \Delta\varepsilon_1 = -2A \\ E_{2,3} = \varepsilon_{2,3} + \Delta\varepsilon_{2,3} = \pm 2\varepsilon \\ E_4 = \varepsilon_4 + \Delta\varepsilon_4 = 2A \end{cases} \tag{14.10.10}$$

与(b)中得到的严格解相同.

**14.11** 在中心力场中运动的电子由哈密顿算符 $H = H_0 + H_{s0}$ 描述,其中 $H_0 = \frac{|\boldsymbol{P}|^2}{2m} + V(r)$, $H_{s0} = \zeta(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$. 自旋-轨道耦合使得 $\boldsymbol{L}^2$ 和 $\boldsymbol{S}^2$ 相同但 $\boldsymbol{J}^2$ 不同的能级发生分裂,此处 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$. (a)证明 $[H, L^2] = [H, S^2] = 0$ 但是 $[H, L_z] \neq 0$ 和 $[H, S_z] \neq 0$; (b)证明 $[H, \boldsymbol{J}^2] = [H, J_z] = 0$; (c)考虑同样是 $\{L^2, S^2, \boldsymbol{J}^2, J_z\}$ 的本征态的 $H$ 的定态. 将这些本征函数的角向部分用球谐函数和二分量旋量表示出来; (d)设(c)中的本征函数由量子数 $l$、$J$ 和 $M$(分别对应于 $\boldsymbol{L}^2$、$\boldsymbol{J}^2$ 和 $J_z$ 的本征值)描述,给出 $L_z$ 和 $S_z$ 的本征值,对应的取值概率及平均值.

**解答** (a) 哈密顿算符与 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 的各分量对易且 $\boldsymbol{L}$ 只作用在角坐标 $(\theta, \phi)$ 上(见第六章). 这样

$$[H, \boldsymbol{L}^2] = [H_0 + \zeta(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \boldsymbol{L}^2] = \zeta(r)[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \boldsymbol{L}^2] \tag{14.11.1}$$

我们还有 $[\boldsymbol{S}_i, \boldsymbol{L}_i] = 0$ 和 $[\boldsymbol{L}_j, \boldsymbol{L}^2] = 0$ 对于所有的分量 $i, j = x, y, z = 1, 2, 3$ 成立,这样

$$[H, \boldsymbol{L}^2] = \zeta(r)\sum_{i=1}^{3}([L_i, \boldsymbol{L}^2]S_i + L_i[S_i, \boldsymbol{L}^2]) = 0 \tag{14.11.2}$$

将(14.11.2)中的 $\boldsymbol{L}$ 换成 $\boldsymbol{S}$,我们有

$$[H, \boldsymbol{S}^2] = \zeta(r)\sum_{L=1}^{3}([L_i, \boldsymbol{S}^2]S_i + L_i[S_i, \boldsymbol{S}^2]) = 0 \tag{14.11.3}$$

利用关系 $[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$ 我们得到

$$\begin{aligned}[H, L_z] &= [H_0 + \zeta(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, L_z] = \zeta(r)[L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z, L_z] \\ &= \zeta(r)[L_x, L_z]S_x + \zeta(r)[L_y, L_z]S_y = i\hbar\zeta(r)(-L_yS_x + L_xS_y) \neq 0\end{aligned} \tag{14.11.4}$$

和

$$[H, S_z] = \zeta(r)L_x[S_x, S_z] + \zeta(r)L_y[S_y, S_z] = i\hbar\zeta(r)(-L_xS_y + L_yS_x) \neq 0 \tag{14.11.5}$$

(b)从(14.11.4)和(14.11.5)立即得出

$$[H, J_z] = [H, L_z + S_z] = 0 \tag{14.11.6}$$

还有

$$\begin{aligned}[H, \boldsymbol{J}^2] &= [H, (L+S)^2] = [H, \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{S}^2 + 2\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}] = 2[H, \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}] \\ &= 2[H_0 + \zeta(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}] = [H_0, \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}] + 2\zeta(r)[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}] = 0\end{aligned} \tag{14.11.7}$$

(c)(a)和(b)的结果说明我们能够构造由 $\{H, L^2, S^2, J^2, J_z\}$ 的公共本征态构成基 $|nlSLM\rangle = R_{nl}(r)|JM\rangle$. 这些本征函数的角向部分 $|JM\rangle$ 的表达式在题 14.9 中已经求出

$$
\begin{cases}
\text{I} & \left|J = l + \frac{1}{2}, M\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l + M + \frac{1}{2}}\left|M - \frac{1}{2}, +\right\rangle + \sqrt{l - M + \frac{1}{2}}\left|M + \frac{1}{2}, -\right\rangle\right] \\
\text{II} & \left|J = l - \frac{1}{2}, M\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l + M + \frac{1}{2}}\left|M + \frac{1}{2}, -\right\rangle - \sqrt{l - M + \frac{1}{2}}\left|M - \frac{1}{2}, +\right\rangle\right]
\end{cases}
\tag{14.11.8}
$$

(14.11.8)右方的状态 $\left|M \pm \frac{1}{2}, \pm\right\rangle \equiv |M\pm\rangle$ 为电子的轨道角动量 $l$ 和自旋角动量 $S = 1/2$ 的乘积形式的本征态 $|lm\rangle \otimes \left|S = \frac{1}{2}, \pm\right\rangle$. 在坐标表象里, $\langle \boldsymbol{r}(r,\theta,\phi) | l, m\rangle = Y_m^l(\theta,\phi)$ 其中 $Y_m^{(l)}(\theta,\phi)$ 是球谐函数(见第六章). 这样

$$
\begin{cases}
\text{I} & \left|J = l + \frac{1}{2}, M\right\rangle = \sqrt{\frac{l + M + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{M-1/2}(\theta,\phi)\,|+\rangle + \sqrt{\frac{l - M + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{M+1/2}(\theta,\phi)\,|-\rangle \\
\text{II} & \left|J = l + \frac{1}{2}, M\right\rangle = \sqrt{\frac{l + M + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{M+1/2}(\theta,\phi)\,|-\rangle + \sqrt{\frac{l - M + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{M-1/2}(\theta,\phi)\,|+\rangle
\end{cases}
\tag{14.11.9}
$$

其中 $-J \leqslant M \leqslant J$. 由(14.11.8)和(14.11.9)给出的角向波函数满足

$$
\begin{aligned}
&\text{I}\begin{cases} \boldsymbol{J}^2 |JM\rangle = \hbar^2 J(J+1) |JM\rangle \\ J_z |JM\rangle = \hbar M |JM\rangle \end{cases} \\
&\text{II}\begin{cases} \boldsymbol{L}^2 |JM\rangle = \hbar^2 l(l+1) |JM\rangle \\ \boldsymbol{S}^2 |JM\rangle = \hbar^2 (3/4) |JM\rangle \end{cases}
\end{aligned}
\tag{14.11.10}
$$

作为推论

$$
\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}|JM\rangle = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2)|JM\rangle = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]|JM\rangle
\tag{14.11.11}
$$

(d)算符 $\boldsymbol{L}_z$ 的取值为 $\hbar m$, 此处 $m$ 是满足 $-l \leqslant m \leqslant l$ 的整数. 算符 $S_z$ 的取值为 $\pm\hbar/2$, 此处 $\pm$ 表示自旋向上或向下. 相应的取值概率由(14.11.8)式中的CG系数和系统所处的状态相关.

1. 在 $\left|J = l + \frac{1}{2}, M\right\rangle$ 态中我们有

$$
\begin{cases}
\text{I} & \text{prob}\left(m = M - \frac{1}{2}, +\right) = \frac{l + M + 1/2}{2l+1} \\
\text{II} & \text{prob}\left(m = M + \frac{1}{2}, -\right) = \frac{l - M + 1/2}{2l+1}
\end{cases}
\tag{14.11.12}
$$

其中 $|M| \leqslant l + 1/2$. 在 $M = l + 1/2$ 时, $\text{prob}(m = l, +) = 1$, 而其他组合的概率均为 0. $L_z$ 的平均值为

$$
\begin{aligned}
\langle L_z\rangle &= \left\langle l + \frac{1}{2}, M\right| L_z \left| l + \frac{1}{2}, M\right\rangle = \text{prob}\left(m = M - \frac{1}{2}\right)\hbar\left(M - \frac{1}{2}\right) \\
&\quad + \text{prob}\left(m = M + \frac{1}{2}\right)\hbar\left(M + \frac{1}{2}\right) \\
&= \frac{\hbar}{2l+1}\left[\left(l + M + \frac{1}{2}\right)\left(M - \frac{1}{2}\right)\right. \\
&\quad \left. + \left(l - M + \frac{1}{2}\right)\left(M + \frac{1}{2}\right)\right] = \hbar l\,\frac{2M}{2l+1}
\end{aligned}
\tag{14.11.13}
$$

类似地, $S_z$ 的平均值为

$$
\langle S_z\rangle = \left\langle l + \frac{1}{2}, M\right| S_z \left| l + \frac{1}{2}, M\right\rangle = \frac{\hbar}{2l+1}\left[\left(l + M + \frac{1}{2}\right)\cdot\frac{1}{2} + \left(l - M + \frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}\right)\right]
$$

$$=\frac{\hbar}{2}\frac{2M}{2l+1} \tag{14.11.14}$$

2. 在$\left|J=l-\frac{1}{2},M\right\rangle$态中我们有

$$\begin{cases}\text{I}\quad \text{prob}\left(m=M-\frac{1}{2},-\right)=\frac{l+M+1/2}{2l+1}\\ \text{II}\quad \text{prob}\left(m=M-\frac{1}{2},+\right)=\frac{l-M+1/2}{2l+1}\end{cases} \tag{14.11.5}$$

其中 $m\leqslant 1-1/2$. $L_z$ 和 $S_z$ 的平均值为

$$\begin{cases}\text{I}\quad \langle L_z\rangle=\langle l-\frac{1}{2},M|L_z|l-\frac{1}{2},M\rangle=\hbar M\\ \text{II}\quad \langle S_z\rangle=\langle l-\frac{1}{2},M|S_z|l-\frac{1}{2},M\rangle=-\frac{\hbar}{2}\frac{2M}{2l+1}\end{cases} \tag{14.11.16}$$

**14.12** 类氢原子中电子的自旋-轨道相互作用由$H_{s0}=\zeta(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$给出,其中$\zeta(r)=\frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}v(r)}{\mathrm{d}r}$, $V(r)=-\frac{2e^2}{r}$. (a)将一阶微扰能级用$l$[注:$l$不等于0.因$l=0$时无自旋-轨道耦合.]和$J$表示出来.(b)证明自旋-轨道耦合引起的能级修正正比于$Z^4$.

**解答** (a) 我们的问题的总哈密顿算符为$H=H_0+H_{s0}$此处

$$H_0=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2m_e}+V(r)=\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{1}{2m_er^2}\boldsymbol{L}^2(\theta,\phi)+V(r) \tag{14.12.1}$$

并将$H_{s0}$作为小微扰.为了方便,我们将$H_0$的未微扰波函数取成$\{L^2,S^2,J^2,J_z\}$的公共本征函数,此处$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$.由此

$$H_0R_{nl}^0(r)|JM\rangle=E_{nl}^0R_{nl}^0(r)|JM\rangle \tag{14.12.2}$$

其中$R_{nl}^0(r)$是$H_0$对应的径向波函数,$E_{nl}^0$是相应的能级(见第八章).(14.12.2)中的右矢$|JM\rangle$给出了$H_0$对应的包含自旋态的角向波函数.利用此表达式[见(14.11.7),(14.11.8)和(14.11.10)],对于$l\neq0$,我们得到

$$H_0R_{nl}^0(r)|JM\rangle=\frac{\hbar^2\zeta(r)}{2}R_{nl}^0(r)[J(J+1)-l(l+1)-3/4]|JM\rangle \tag{14.12.3}$$

此处$J\leqslant l\pm1/2$, $|M|\leqslant J$.表达式(14.12.3)说明微扰$H_{s0}$在对应于简并能级$E_{nl}^0$的子空间$\{n,l=J\pm1/2\}$里已经是对角化的了.利用一阶微扰论

$$E(n,l,J)=E_{nl}^0+\langle nl,JM|H_{s0}|nl,JM\rangle \tag{14.12.4}$$

此处$\langle r|nl\rangle\equiv R_{nl}^0(r)$,定义包含径向波函数的积分

$$\zeta_{nl}\equiv\langle nl|\zeta(r)|nl\rangle=\int r^2R_{nl}^{0*}(r)\zeta(r)R_{nl}^0(r)\mathrm{d}r \tag{14.12.5}$$

再应用表达式(14.12.3),我们有

$$E(n,l,J)=E_{nl}^0+\frac{\hbar^2}{2}\zeta_{nl}[J(J+1)-l(l+1)\quad 3/4] \tag{14.12.6}$$

由于$J=l\pm\frac{1}{2}$,我们将两种情况区分开来

$$E(n,l,J)=\begin{cases}E_{nl}^0+\zeta_{nl}\hbar^2l/2, & J=l+1/2\\ E_{nl}^0+\zeta_{nl}\hbar^2(l+1)/2, & J=l-1/2\end{cases} \tag{14.12.7}$$

每个能级都是$2J+1$重简并的.在磁场下这个简并将被解除(见题14.13).

(b)自旋-轨道耦合的一阶能级修正正比于径向积分$\zeta_{nl}$.对于$l\neq0$,我们得到

$$\xi_{nl}=\langle nl|\frac{1}{2m_e^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)|nl\rangle=\frac{1}{2m_e^2c^2}\langle nl|\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)|nl\rangle$$

$$= \frac{Ze^2}{2m_e^2c^2}\langle nl|r^{-3}|nl\rangle = \frac{Z\alpha^2\hbar^2}{2m_e^2c^2}\langle nl|r^{-3}|nl\rangle \tag{14.12.8}$$

对$\langle r^{-3}\rangle_{nl}$的计算给出(见第八章)

$$\langle nl|r^{-3}|nl\rangle = \left(\frac{1}{a_B n}\right)^3 \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)} \tag{14.12.9}$$

其中 $a_B = \hbar^2/ze^2m_e$ 是玻尔半径.最后

$$\zeta_{nl} = \frac{(Ze)^4 m_e}{2\hbar^4}\frac{\alpha^2}{n^3}\frac{1}{l(l+1/2)(l+1)} \tag{14.12.10}$$

**14.13** 一个放在弱磁场 $\boldsymbol{B} = B\hat{Z}$ 中的类氢原子的相互作用哈密顿算符为 $H' = \mu_B B(L_z + 2S_z)/\hbar$[给出 Zeemen 效应],(a)假设在无磁场 $\boldsymbol{B}$ 的情况下,原子的波函数是 $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ 和 $J_z$ 的本征函数,此处 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$.利用一阶微扰论计算在磁场下的能级分裂;(b)假定这个原子被激发到 p 态.在弱磁场下这些能级分裂成几条?

**解答** (a) 微扰哈密顿算符可写成下式:

$$H' = \frac{\mu_B B(L_z + 2S_z)}{\hbar} = \frac{\mu_B B(J_z + S_z)}{\hbar} \tag{14.13.1}$$

其中 $\mu_B$ 是玻尔磁子.总哈密顿算符 $H = H_0 + H_0 + H'$对应的能级 $E = E(n,l,J) + \Delta E$ 由下式给出:

$$\begin{aligned}\Delta E &= \mu_B B\langle J = l \pm \frac{1}{2}, M|(J_z + S_z)|J = l \pm \frac{1}{2}, M\rangle \\ &= \mu_B B\left[M + \langle J = l + \frac{1}{2}, M|S_z|J = l \pm \frac{1}{2}, M\rangle\right]\end{aligned} \tag{14.13.2}$$

$S_z$ 的矩阵元在题 14.11 中已经算出.利用(14.11.12)和(14.11.14)相应的结果,我们有

$$\langle J = l \pm \frac{1}{2}, M|S_z|J = l \pm \frac{1}{2}, M\rangle = \pm\frac{\hbar M}{2l+1} \tag{14.13.3}$$

由此

$$\Delta E = \mu_B B\left[1 \pm \frac{1}{2l+1}\right] \tag{14.13.4}$$

(b)在磁场不存在时,系统有由量子数($l = 1, S = 1/2$)给出的两个能级(见(14.12.7)).在加入磁场后,简并被解除.$J = 3/2$ 的能级分裂成 4 个,对应于 $M = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$.与之类似,$J = 1/2$ 能级分裂成 $M = -1/2, 1/2$ 两个能级.能量的变化由(14.13.4)给出.此即

$$\Delta E(l,J) = g(l,J)\mu_B BM \tag{14.13.5}$$

$$g(l,J) = \left[1 \pm \frac{1}{(2l+1)}\right] \tag{14.13.6}$$

其中 $g$ 是 Lande 因子.特别地,$g(1,3/2) = 4/3$, $g(1,1/2) = 2/3$.

## 补充习题

**14.14** 证明 CG 系数满足下面的关系:

$$\begin{aligned}\sqrt{J(J+1) - M(M\pm1)}\langle m_1 m_2|J, M+1\rangle &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1\mp1)}\langle m_1 \mp 1, m_2|JM\rangle \\ &+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2\mp1)}\langle m_1, m_2 - 1|JM\rangle\end{aligned} \tag{14.14.1}$$

**14.15** 考虑一个由自旋 $I = 1$ 的核和电子构成的氘原子.电子的角动量为 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$,其中 $\boldsymbol{L}$ 是电子的轨道角动量而 $\boldsymbol{S}$ 是电子的自旋.原子的总角动量 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{I}$,其中 $\boldsymbol{I}$ 是核自旋.$\boldsymbol{J}^2$ 和 $\boldsymbol{F}^2$ 的本征值分别为 $J(J+1)\hbar^2$和 $F(F+1)\hbar^2$.(a)在氘原子的 1s 基态中,$J$ 和 $F$ 的可能取值是什么? (b)对于 2p 激发态

回答(a)中的问题;(c)量子数 $J$ 和 $F$ 在氢原子的 2p 能级中的可能取值是什么? 氢原子核为自旋 1/2 的质子.

**答案**

(a) $J=1/2, F=1/2,3/2$

(b) I 若 $J=1/2, F=1/2,3/2$;　　II 若 $J=3/2, F=1/2,3/2,5/2$.

(c) I 若 $J=1/2, F=0,1$;　　II 若 $J=3/2, F=1,2$.

**14.16** 设 $S=S_1+S_2+S_3$ 是 3 个自旋 1/2 粒子的总自旋 $|m_1m_2m_3\rangle$ 为 $S_{1z}, S_{2z}$ 和 $S_{3z}$ 的公共本征函数(共有 $2^3=8$ 个状态). (a)总自旋的可能取值是什么? (b)用 $|m_1m_2m_3\rangle$ 构造一组由 $S^2$ 和 $S_z$ 的公共本征态构成的基. 提示:首先考虑两个自旋的耦合,再加入第三个自旋. *

**答案**

(a)1/2,3/2. (b) $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-+\rangle-|-++\rangle)=\sqrt{\frac{2}{3}}|++-\rangle-\sqrt{\frac{1}{6}}(|+-+\rangle+|-++\rangle)$,

$\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+--\rangle-|-+-\rangle)=\sqrt{\frac{1}{6}}(|+--\rangle+|-+-\rangle)-\sqrt{\frac{2}{3}}|--+\rangle$, $\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$ $=|+++\rangle$,

$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}(|++-\rangle+|+-+\rangle+|-++\rangle)$, $\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}(|+--\rangle+|-+-\rangle+|--+\rangle)$,

$\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle=|---\rangle$

$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}(|-++\rangle+|+-+\rangle-2|++-\rangle)$, $\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}(2|--+\rangle-|+--\rangle-|-+-\rangle)$

* 原著中本题还有第三问"(c)Do the oprators form a complete basis?". 但这是错误的! 三个 1/2 角动量可以耦合成一个 3/2 角动量和两个 1/2 角动量. 对于角动量 1/2,存在两个线性无关的磁量子数同为 1/2 的状态——这就是著名的多个角动量耦合的非简单可约性! 必须把 2 个线性无关的角动量同为 1/2 的 2 维子空间都构造出来才能得到由 $S^2$ 和 $S_z$ 的公共本征态构成的基. 从本题的答案和(c)问来看显然作者对这个问题理解有错. 现将(c)问删去并将答案改正——译者注.

# 第十五章　散射理论

## 15.1　散射截面

图 15-1 描述了一个典型的散射问题.

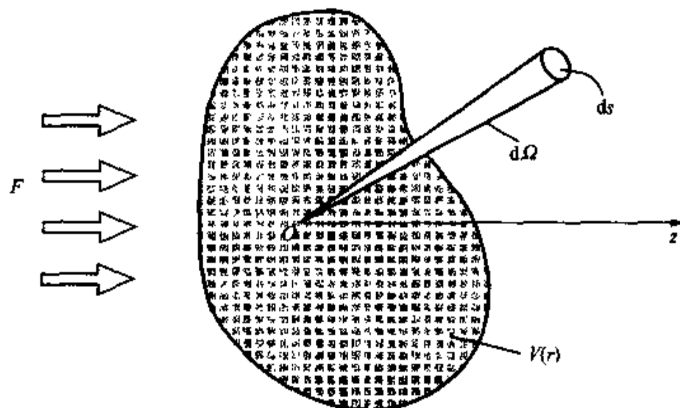



图 15-1

一束粒子被势场 $V(r)$散射,坐标原点取在 $O$ 点.定义微分截面 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ 为单位时间被散射到$(\theta,\phi)$方向上立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 内的粒子数 $\mathrm{d}n(\theta,\phi)$与 $\mathrm{d}\Omega$ 和流强$F$ 之比

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\mathrm{d}n(\theta,\phi)}{F\mathrm{d}\Omega}\tag{15.1}$$

$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ 具有面积的量纲.我们还需要假定:

(1) 忽略被散射的粒子之间的所有相互作用.

(2) 忽略所有的多重散射——所谓"多重散射"指的是粒子被靶多次散射.

(3) 入射束流的宽度远远大于散射势的特征线度,此时的入射粒子可以认为有确定的动量.对 $\mathrm{d}\Omega$ 积分,我们得到总截面

$$\sigma_T=\int\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\mathrm{d}\Omega\tag{15.2}$$

实验室系和质心系中的微分截面之间的关系为

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)^{\mathrm{Lab}}=\frac{(1+\gamma^2+2\gamma\cos\theta)^{3/2}}{|1+\gamma\cos\theta|}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)^{\mathrm{CM}}\tag{15.3}$$

这里 $\theta$ 是质心系里的散射角

$$\gamma=m_1/m_2\tag{15.4}$$

## 15.2　定态散射

考虑一个约化质量为 $\mu$,动量 $\boldsymbol{P}=\hbar\boldsymbol{k}$ 的粒子在时间无关的势场 $V=V(r)$中的散射问题(在本节中我们用约化质量 $\mu$ 来代替质量 $m$).系统的哈密顿算符为

$$H=H_0+V(\boldsymbol{r})\tag{15.5}$$

其中 $H_0$ 是自由粒子的哈密顿算符，$H_0=\hbar^2k^2/2\mu$. 能量 $E>0$ 的散射粒子的波函数可以通过求解定态薛定谔方程得出

$$[\nabla^2+k^2-U(\boldsymbol{r})]\phi(\boldsymbol{r})=0 \tag{15.6}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \tag{15.7}$$

$$U(\boldsymbol{r})=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r}) \tag{15.8}$$

对于两个粒子的散射问题，$V(\boldsymbol{r})$是粒子之间的相互作用势($\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$)，而 $E$ 则是质心系中约化质量为 $\mu$ 的粒子的动能.

对于比 Coulomb 势力程更短的位势 $V(\boldsymbol{r})$[在 $\boldsymbol{r}\to\infty$时 $\boldsymbol{r}V(\boldsymbol{r})\to 0$]，薛定谔方程的解能够写成入射平面波和振幅为 $f_k(\theta,\phi)$的球面波的叠加

$$\phi(r)_{r\to\infty}\to \mathrm{e}^{ikz}+f_k(\theta,\phi)\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \tag{15.9}$$

散射振幅 $f_k(\theta,\phi)$与位势和散射角有关. 这个量与微分截面直接相关.

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta,\phi)}{\mathrm{d}\Omega}=|f_k(\theta,\phi)|^2 \tag{15.10}$$

## 15.3 Born 近似

将位势 $U(\boldsymbol{r})$当作微扰，我们得到 Born 近似. 散射振幅的公式为

$$f_k^B(\theta,\phi)=-\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' \tag{15.11}$$

其中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{k}_i$，$\boldsymbol{k}_i$ 和 $\boldsymbol{k}_f$ 分别是初态和末态的动量. 注意！Born 近似下的散射振幅 $f_k^B$ 正比于 $U(\boldsymbol{r})$在傅里叶变换下的像函数在 $\boldsymbol{q}$ 处的取值. 如果位势是球对称的，$U(\boldsymbol{r})=U(r)$，(15.11)可以通过把 $\boldsymbol{q}$ 的方向取为极轴并对立体角 $\mathrm{d}\Omega'$进行积分来简化. 此时我们得到

$$f_k^B(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \sin(qr)rV(r)\mathrm{d}r \tag{15.12}$$

其中 $q=2k\sin(\theta/2)$为动量转移而 $k=|\boldsymbol{k}_f|=|\boldsymbol{k}_i|$；见图 15-2.

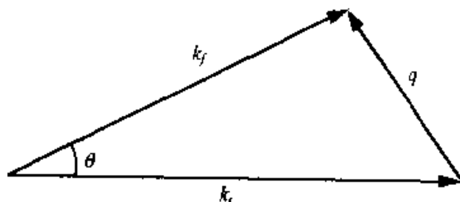



图 15-2

Born 近似的适用条件由下面的式子给出：

$$\frac{\mu}{2\pi\hbar}\left|\int \mathrm{d}^3r'\frac{\mathrm{e}^{ik\cdot|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\right|\ll 1 \tag{15.13}$$

在 $V(\boldsymbol{r})$是中心力场时，(15.12)化为

$$\frac{2\mu}{\pi^2 k}\left|\int_0^{+\infty} \mathrm{d}r' \mathrm{e}^{ikr'} V(r') \sin kr'\right| \ll 1 \tag{15.14}$$

第二个条件说明 Born 近似对于足够快(能量足够高)的粒子总是成立的.这个条件比第一个条件要弱.如果位势在能量低的时候也能看作微扰,它在能量高时也一定能看作微扰,反过来的情况一般不成立.

### 15.4 分波展开

考虑球对称的位势,$V(\boldsymbol{r}) = V(r)$.在这种情况下定态波函数 $\phi_k(r,\theta)$和散射振幅 $f_k(\theta)$可用勒让德多项式 $\mathrm{P}_l(\cos\theta)$展开

$$\phi_k(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l \frac{\chi_l(r)\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{r} \tag{15.15}$$

和

$$f_k(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)f_l \mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{15.16}$$

其中系数 $A_l$、$f_l$ 和函数$\chi_l(r)$待定.$\chi_l(r)$满足径向薛定谔方程

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r) = 0 \tag{15.17}$$

边界条件取为 $\chi_l(0)=0$.在渐近区域 $r\to\infty$里,

$$\chi_l(r)_{r\to\infty} \sim [A_l \mathrm{j}_l(kr) + B_l \mathrm{n}_l(kr)]r = \frac{1}{k}C_l \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) \tag{15.18}$$

这里 $\mathrm{j}_l$ 和 $\mathrm{n}_l$ 分别是球贝塞尔函数和球诺伊曼函数.参数 $\delta_l$ 称为相移,因为它给出了 $\chi_l(r)$在渐近区域内与自由径向薛定谔方程的解之间的位相差

$$\chi_l^0(r)_{r\to\infty} \sim \frac{1}{k}C_l \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \tag{15.19}$$

同样,我们可以将平面波用勒让德多项式展开:

$$\mathrm{e}^{ikz} = \mathrm{e}^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1)\mathrm{j}_l(kr)\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{15.20}$$

将 $\mathrm{e}^{ikz}$、$f_k(\theta)$和 $\phi_k(r,\theta)$的展开式代入(15.15),我们得到 $A_l = (2l+1)i^l \mathrm{e}^{i\delta_l}$和

$$f_k(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\mathrm{e}^{2i\delta_l} - 1)\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{15.21}$$

由此,微分截面由下式给出:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{i\delta_l}\sin\delta_l \mathrm{P}_l(\cos\theta)\right|^2 \tag{15.22}$$

总截面为

$$\sigma_T = 2\pi\int_0^{\pi} |f(\theta)|^2 \sin\theta \mathrm{d}\theta = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{15.23}$$

由(15.21)和(15.23)我们验证了

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}(f_k(0)) \tag{15.24}$$

这个结论称为光学定理.相移 $\delta_l$ 由径向波函数的渐近行为完全确定.展开式(15.23)对于在

$r<a$ 区域外面为零的短程势特别有用. 在这种情况下, 满足条件 $l(l+1)>ka$ 的分波可以忽略. 其次, 由于在边界 $r=a$ 处波函数 $R_l(r)=\chi_l(r)/r$ 及其导数连续, 我们有

$$\tan\delta_l = \frac{k\mathrm{j}'_l(ka)-\gamma_l\mathrm{j}_l(ka)}{k\mathrm{n}'_l(ka)-\gamma_l\mathrm{n}_l(ka)} \tag{15.25}$$

此处 $\gamma_l$ 是由下式定义的对数导数:

$$\gamma_l = \frac{1}{R_l}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}\bigg|_{r=a} \qquad \left[R_l(r) = \frac{1}{r}\chi_l(r)\right] \tag{15.26}$$

对于 Born 近似也成立的相当弱的位势, 所有相移都很小并可以用下式给出:

$$\sin\delta_l \approx \delta_l = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int V(r)\mathrm{j}_l^2(kr)\mathrm{d}r \tag{15.27}$$

## 15.5　全同粒子的散射

两个全同粒子的散射需要加以特别考虑. 对于两粒子空间波函数对称的情况, 微分截面为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 \tag{15.28}$$

而对于两粒子空间波函数反对称的情况, 微分截面为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2 \tag{15.29}$$

例如, 对于 $s=1/2$ 的粒子, 自旋波函数可为单态(总自旋为 0)和三重态(总自旋为 1). 对应的空间波函数的对称性是完全不同的.

## 例 题 解 答

**15.1**　一个质量为 $\mu$、动量 $\mathbf{P}=\hbar\mathbf{k}$ 的粒子被势场 $V(\mathbf{r})=\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r}V_0a$ 散射, 此处 $V_0$ 和 $a>0$ 是实常数(汤川势). (a)应用 Born 近似计算微分截面; (b)计算总截面.

**解**　(a) 汤川势的力程与 $a$ 有关. 我们假定 $V_0a^2\ll\hbar^2/\mu$, 此时对于任意的 $ka$ 值 Born 近似都成立(由(15.12)得到). 散射振幅为

$$f(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu V_0a}{\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\frac{\mathrm{e}^{-r/r_0}}{r}\mathrm{d}^3r \tag{15.1.1}$$

由于位势是球对称的, $V(\mathbf{r})=V(r)$, 利用下边的等式我们可以将积分算出:

$$\int r^2\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}V(r)\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty \sin(qr)V(r)r\mathrm{d}r \tag{15.1.2}$$

此处 $r=|\mathbf{r}|$, $\mathrm{d}\Omega=\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi$. 由此

$$f(\theta) = -\frac{2\mu V_0a}{\hbar^2k}\int_0^\infty r\sin(kr)\mathrm{e}^{-r/a}\mathrm{d}r = -\frac{2\mu V_0a^3}{\hbar^2}\frac{1}{1+q^2a^2}$$

$$= -\frac{2\mu V_0a^3}{\hbar^2}\frac{1}{1+[2ka\sin(\theta/2)]^2} \tag{15.1.3}$$

最后, 微分截面 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|f(\theta)|^2$ 为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{4\mu^2V_0^2a^6}{\hbar^4}\frac{1}{[1+4k^2a^2\sin^2(\theta/2)]^2} \tag{15.1.4}$$

(b) 总截面由下面的积分给出:

$$\sigma = \int \frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\Omega}\mathrm{d}\Omega = \frac{4\mu^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4}\frac{4\pi}{1+4k^2a^2} \tag{15.1.5}$$

注意到在无限力程的极限下($a\to\infty$, $V_0\to 0$, $V_0 a = Z_1 Z_2 e^2 =$ 常数)，汤川势相当于电荷分别为 $Z_1 e$ 和 $Z_2 e$ 的离子之间的 Coulomb 相互作用. 此时(15.1.4)成为著名的 Rutherford 公式

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{4\mu^2}{\hbar^4}\frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16k^4\sin^4(\theta/2)} = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E^2\sin^4(\theta/2)} \tag{15.1.6}$$

其中 $E=\hbar^2k^2/2\mu$ 是质心系中的粒子能量，$\mu$ 是其约化质量.

**15.2**　应用 Born 近似计算中心高斯势 $V(\boldsymbol{r}) = \frac{V_0}{\sqrt{4\pi}}\mathrm{e}^{-r^2/4a^2}$ 对应的微分截面 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$。将得到的结果与汤川势 $V(\boldsymbol{r}) = \frac{V_0 a}{r}\mathrm{e}^{-r/a}$ 的微分截面对照.

**解答**　对于 Born 近似下的高斯势，我们有

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \sin(qr)V(r)r\mathrm{d}r = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q\sqrt{4\pi}}\frac{\partial}{\partial q}\int_0^\infty \cos(qr)\mathrm{e}^{-r^2/4a^2}\mathrm{d}r$$
$$= \frac{2\mu V_0}{\sqrt{4\pi}\hbar^2 q}\frac{\partial}{\partial q}\frac{\sqrt{4\pi}}{2}a\mathrm{e}^{-q^2a^2} = -\frac{2\mu V_0 a^3 q}{\hbar^2 q}\mathrm{e}^{-q^2a^2} \tag{15.2.1}$$

此处 $q = 2k\sin(\theta/2)$. 由此

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{G}} = \frac{4\mu^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4}\mathrm{e}^{-2q^2a^2} \tag{15.2.2}$$

对于题 15.1 中的汤川势，我们有

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{Y}} = \frac{4\mu^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4}\frac{1}{[1+q^2a^2]^2} \tag{15.2.3}$$

图 15-3 中画出了(15.2.2)和(15.2.3)给出的微分截面的唯象结果.

在 $qa\ll 1$ 时，两个截面相合，且有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{4\mu^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4}(1-2q^2a^2) \tag{15.2.4}$$

图 15-3

这说明在动量转移较小(距离较大)时短程上的散射势的形状并不重要. 另一方面，在动量转移较大时，高斯势对应的散射截面的下降速度比汤川势更快. 由于高斯势在短程上比汤川势弱，这个结论是可以预料的.

**15.3**　证明：在散射势满足平移不变性 $V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = V(\boldsymbol{r})$ 其中 $\boldsymbol{R}$ 是常矢量时，除了 $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R} = 2\pi n$(此处 $n$ 为整数)的情况之外，一阶 Born 近似的结果为 0. *

**证明**　位势的平移对称性 $V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = V(\boldsymbol{r})$ 导致

$$\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3r \tag{15.3.1}$$

在(15.3.1)式的右端做代换 $\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}$，我们得到

$$\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'+\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}}V(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' \tag{15.3.2}$$

即

$$\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}}V(\boldsymbol{r})[1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}}]\mathrm{d}^3r = 0 \tag{15.3.3}$$

等式(15.3.3)在下列条件至少有一个满足时成立：

* 本题出得很有问题！因为满足已知条件的位势在无穷远处不为 0，因而根本无法提“散射”的问题！只能用本题来检验读者是否记得一阶 Born 近似的截面公式——译者注.

$$\begin{aligned} &\text{I} \quad \int e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} V(\boldsymbol{r}) d^3 r = 0 \qquad (q\ \text{任意}) \\ &\text{II} \quad e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}} = 1 \to \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R} = 2\pi n \quad (-\ n\ \text{为整数}) \end{aligned} \tag{15.3.4}$$

Born 散射振幅 $f^B(\boldsymbol{q})$正比于 $V(\boldsymbol{r})$的傅里叶变换.除非(15.3.4II)式满足,否则 $f^B(\boldsymbol{q})$恒等于0.此即

$$f^B(\boldsymbol{q}) = \sum_k f_q \delta_{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k}} \qquad (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R} = 2\pi n) \tag{15.3.5}$$

注意到散射势的平移不变性实际上相当于粒子被格点的散射,满足等式 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}=2\pi n$ 的矢量 $\boldsymbol{k}$ 的集合就是倒格子[注:对偶格点的全体构成的集合].(15.3.4II)说明散射振幅只有在动量转移 $\boldsymbol{q}$ 等于某个倒格矢量时才不为0.这个结论与 Bragg-Von Laue 散射条件相吻合.

**15.4** 应用 Born 近似,将电子在球对称电荷分布 $\rho(\boldsymbol{r})$下的非相对论微分散射截面表示成被点电荷 $q$ 散射的微分截面(Rutherford 散射)和形状因子 $F(\boldsymbol{k})$的平方的乘积,其中 $\boldsymbol{k}$ 为动量转移.对于在半径 $R$ 中的均匀电荷分布和高斯型电荷分布,分别计算 $F(\boldsymbol{k})$.

**解答**. Born 近似下的微分截面为

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} V(\boldsymbol{r}) d^3 r\right|^2 \tag{15.4.1}$$

其中 $\mu$ 是非相对论的电子质量,$\boldsymbol{k}$ 为动量转移.由题意,电子被一个能用下式给出的卷积形式的球对称的位势 $V(\boldsymbol{r})=V(r)$散射

$$V(\boldsymbol{r}) = -\int \frac{e\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} d^3 r' = \left(-\frac{eq}{r}\right) * \left(\frac{\rho(r)}{q}\right) \tag{15.4.2}$$

(15.4.2)右方的第一项对应于 Coulomb 相互作用,它给出(见题15.1)Rutherford 截面.这样有

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R \underbrace{\left|\frac{1}{q}\int e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \rho(r) d^3 r\right|^2}_{F(k)} \tag{15.4.3}$$

对于半径 $R$ 内的均匀电荷分布

$$\rho(r) = \begin{cases} \dfrac{3q}{4\pi R^3}, & r < R \\ 0, & r > 0 \end{cases} \tag{15.4.4}$$

我们有

$$F(k) = \left|\frac{4\pi}{k}\left(\frac{3}{4\pi}\frac{1}{R^3}\right)\int_0^R r\sin(kr)dr\right|^2 = \left[\frac{3}{R^3 k^2}\left(\frac{\sin(kr)}{k} - r\cos(kr)\right)\right]^2 \tag{15.4.5}$$

与之类似,对于高斯型电荷分布 $\rho(r)=\frac{q}{\pi^{3/2}R^3}e^{-r^2/R^2}$ 得到

$$F(k) = \left|\frac{4\pi}{k}\frac{1}{\pi^{3/2}R^3}\int_0^\infty r\sin(kr)e^{-r^2/R^2} dr\right|^2 = \left[\frac{1}{4\pi}e^{-\frac{r^2k^2}{4}}\right]^2 \tag{15.4.6}$$

**15.5** 考虑球对称势中的散射.薛定谔方程的解可展开成 $\phi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r)P_l(\cos\theta)$,其中 $R_l(r)$是径向波动方程的解而 $P_l(\cos\theta)$是 $l$ 阶勒让德多项式.在 $r\to\infty$极限下,波函数的渐近行为为

$$\phi(r,\theta)_{r\to\infty} \sim e^{ikz} + \frac{1}{r}f(\theta)e^{ikr} \tag{15.5.1}$$

此处 $f(\theta)$为散射振幅.$R_l(r)$的渐近行为是

$$R_l(r)_{r\to\infty} \sim A_l\frac{\sin\left(kr - \dfrac{\pi}{2}l + \delta_l\right)}{kr} \tag{15.5.2}$$

此处 $\delta_l$ 是相移.(a)利用(15.5.1)和(15.5.2)将 $f(\theta)$用勒让德多项式展开.(b)证明总

截面为

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{15.5.3}$$

**解** (a) 波函数的渐近展开由(15.5.1)和(15.5.2)给出

$$\phi(r,\theta)_{r\to\infty} \sim \sum_{l=0}^{\infty} A_l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)}{kr} P_l(\cos\theta) = e^{ikz} + \frac{1}{r}f(\theta)e^{ikr} \tag{15.5.4}$$

利用 $e^{ikz}$ 用勒让德多项式的展开式

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) \tag{15.5.5}$$

我们得到

$$\sum_{l=0}^{\infty} A_l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)}{kr} P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}\left[(2l+1)i^l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)}{kr} + \frac{1}{r}f_l e^{ikr}\right]P_l(\cos\theta) \tag{15.5.6}$$

此处 $f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos\theta)$. 记 $\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$,后得到

$$\begin{aligned} &\text{I} \quad A_l e^{i\left(kr - \pi\frac{l}{2} + \delta_l\right)} - (2l+1)i^l e^{i\left(kr - \pi\frac{l}{2}\right)} = 2ikf_l e^{ikr} \\ &\text{II} \quad A_l e^{-ikr - \pi\frac{l}{2} + \delta_l} - (2l+1)i^l e^{-ikr - \pi\frac{l}{2}} = 0 \end{aligned} \tag{15.5.7}$$

由(15.5.7II)得到 $A_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}$ 代入(15.5.7I),我们有

$$f(\theta) = (2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta) \tag{15.5.8}$$

(b)总截面为

$$\begin{aligned} \sigma &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi\int_{-1}^{1}\frac{d(\cos\theta)}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta)\right|^2 \\ &= \frac{\pi}{2k^2}\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)\sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l'+1)(2l+1)(e^{2i\delta_{l'}} - 1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_{l'}(\cos\theta)P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{15.5.9}$$

由 $\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)P_l(\cos\theta) = \frac{2}{(2l+1)}\delta_{ll'}$ 我们得到

$$\sigma_T = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(2 - e^{2i\delta_l} - e^{-2i\delta_l}) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{15.5.10}$$

**15.6** 考虑如下的硬球势:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > r_0 \\ \infty, & r < r_0 \end{cases}$$

$k_0 r_0 \ll 1$. (a)只考虑 s 波散射,计算 $\delta_0(k)$, $f(k)$, $d\sigma/d\Omega$ 和 $\sigma_T$; (b)写出 $l=1$ 时的径向薛定谔方程,证明 p 波散射的有下式:

$$\chi_{k1}(r) = A\left[\frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) + a\left(\frac{\cos(kr)}{kr} + \sin(kr)\right)\right]$$

此处 $A$ 和 $a$ 是常数; (c)由 $\chi_{k1}(r_0)$ 的渐近条件给出 $\delta_1(k)$. (d)验证在 $k\to 0$ 时 $\delta_1(k) \sim (kr_0)^3$ 和 $\delta_1(k) \ll \delta_0(k)$.

**解** (a) $r > r_0$ 时的径向薛定谔方程为

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_{kl}(r) = 0 \quad (r > 0) \tag{15.6.1}$$

对于无限高的排斥势，我们必须有约束条件 $\chi_{kl}(r_0)=0$. s 波的通解为

$$\chi_{k0}(r)=\begin{cases}C_0\sin k(r-r_0), & r>r_0\\ 0, & r<r_0\end{cases} \tag{15.6.2}$$

由定义，相移 $\delta_0(k)$ 由方程的渐近行为给出，$\delta_0(k)=-kr_0$. 这样，对于 s 波近似

$$\begin{cases}f_k\theta=k^{-1}\mathrm{e}^{-ikr_0}\sin(kr_0)\approx r_0\mathrm{e}^{-ikr_0}\\ \dfrac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=k^{-2}\sin^2(kr_0)\approx r_0^2\\ \sigma_T=\dfrac{4\pi}{k^2}\sin^2(kr_0)\approx 4\pi r_0^2\end{cases} \tag{15.6.3}$$

(b)由(15.6.1)，p 波的径向方程为

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+k^2-\frac{2}{r^2}\right]\chi_{k1}(r)=0 \tag{15.6.4}$$

其通解为(见(15.18))

$$\chi_{k1}(r)=c_1 r\mathrm{j}_1(kr)+d_1 r\mathrm{n}_1(kr) \tag{15.6.5}$$

其中 $\mathrm{j}_1(kr)$和 $\mathrm{n}_1(kr)$是球贝塞尔函数

$$\mathrm{j}_1(x)=\frac{\sin x}{x^2}-\frac{\cos x}{x},\quad \mathrm{n}_1(x)=-\frac{\cos x}{x^2}-\frac{\sin x}{x} \tag{15.6.6}$$

由 $A=c_1/k$ 和 $Aa=d_1/k$ 得到

$$\chi_{k1}(r)=A\left[\frac{\sin(kr)}{kr}-\cos(kr)+a\left(\frac{\cos(kr)}{kr}+\sin(kr)\right)\right] \tag{15.6.7}$$

其中 $A$ 和 $a$ 是与 $r$ 无关的常数.

(c) 由(15.6.7)式和 $\chi_{k1}(r_0)=0$ 得到

$$a=\frac{\cos(kr_0)-\dfrac{\sin(kr_0)}{kr_0}}{\dfrac{\cos(kr_0)}{kr_0}+\sin(kr_0)} \tag{15.6.8}$$

$\chi_{k1}(r_0)$的渐近行为是

$$\begin{aligned}\chi_{k1}(r)_{r\to\infty}&-A[-\cos(kr)+a\sin(kr)]=C_1\sin\left(kr-\frac{\pi}{2}+\delta_1\right)\\ &=C_1\left[\sin\left(kr-\frac{\pi}{2}\right)\cos\delta_1+\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}\right)\sin\delta_1\right]\\ &=C_1\cos\delta_1[-\cos(kr)+\sin(kr)\tan\delta_1]\end{aligned} \tag{15.6.9}$$

在(15.6.9)中，$A=c_1\cos\delta_1$，$a=\tan\delta_1$. 利用(15.6.8)，我们有

$$\tan\delta_1(k)=\frac{\cos(kr_0)-\dfrac{\sin(kr_0)}{kr_0}}{\dfrac{\cos(kr_0)}{kr_0}+\sin(kr_0)} \tag{15.6.10}$$

(d)对于 $kr_0\ll 1$，有

$$\sin(kr_0)\approx kr_0+\frac{(kr_0)^3}{6},\quad \cos(kr_0)\approx 1-\frac{(kr_0)^2}{2} \tag{15.6.11}$$

而由(15.6.10)导出

$$\tan\delta_1(k)\approx\frac{1}{3}(kr_0)^3\Rightarrow\delta_1(k)=-\frac{1}{3}(kr_0)^3 \tag{15.6.12}$$

**15.7**　一个点粒子被另一个有硬芯的粒子散射，散射势为 $V(r)=0, r>a$ 和 $V(r)=\infty, r<$

$a$.散射粒子的能量满足 $ka=1$.(a)给出 $\delta_l$ 的表达式并填入表 15-1 内($\delta_l$ 的单位为弧度);(b)只考虑 $l=0$ 和 $l=1$ 的分波,在散射角为 0 和 $\pi$ 时计算微分截面 $d\sigma/d\Omega$;(c)只考虑 $l=0$ 和 $l=1$ 的分波,计算总截面 $\sigma_T$;(d)$\sigma_T$ 的精确程度如何?

表 15-1

| | $\tan\delta_l$ | $\delta_l$ | $\sin\delta_l$ |
|---|---|---|---|
| $l=0$ | | | |
| $l=1$ | | | |
| $l=2$ | | | |

**解** (a)硬球势对应的相移由下面的等式给出:

$$\tan\delta_l = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}, \tag{15.7.1}$$

由球贝塞尔函数的表达式(见数学附录)

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \qquad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \qquad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3\cos x}{x^2}, \qquad n_2(x) = -\left(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3\sin x}{x^2} \tag{15.7.2}$$

代入 $x=ka=1$,我们得到 $\tan\delta_0=-1.56$, $\tan\delta_1=-0.22$, $\tan\delta_2=-0.02$,填入表内得

表 15-2

| | $\tan\delta_l$ | $\delta_l$ | $\sin\delta_l$ |
|---|---|---|---|
| $l=0$ | -1.56 | -1.00 | -0.84 |
| $l=1$ | -0.22 | -0.22 | -0.22 |
| $l=2$ | -0.02 | -0.02 | -0.02 |

(b)微分截面由下式给出:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2 \tag{15.7.3}$$

对于 $l=0$、1 和 $k=a^{-1}$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = a^2\left|\sin\delta_0 e^{i\delta_0} + 3\sin\delta_1 e^{i\delta_1}\cos\theta\right|^2$$

$$= a^2\left[\sin^2\delta_0 + 6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1)\cos\theta + 9\sin^2\delta_1\cos^2\theta\right] \tag{15.7.4}$$

代入 $\theta=0,\pi$,得到

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{0,\pi} = a^2\left|\sin^2\delta_0 \pm 6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1) + 9\sin^2\delta_1\right| \tag{15.7.5}$$

其中 $\delta_0$ 和 $\delta_1$ 由表 15-2 给出.

(c)总截面由下式给出:

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{15.7.6}$$

对于 $l=0,1$ 和 $k=a^{-1}$

$$\sigma_T = 4\pi a^2\left[\sin^2\delta_0 + 3\sin^2\delta_1\right] \approx (0.85)4\pi a^2 \tag{15.7.7}$$

(d)(c)中结论的精确程度可以通过计算 $l=2$ 的贡献得到

$$\sigma_T \approx (0.85+0.002)4\pi a^2 \tag{15.7.8}$$

**15.8**　考虑一个深度为 $V_0$ 的球方势阱：

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}\tag{15.8.1}$$

记 $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$，$k_0=\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$和 $K^2=k^2+k_0^2$.(a)对于低能散射($ka\ll1$)，计算 $\delta_0$ 和 $\delta_1$.(b)给出 s 波和 p 波发生共振散射的条件.(c)对于低能情况($ka\ll1,\delta_1\ll\delta_0\ll1$)计算远离共振散射时的总截面.

**解答**　(a)我们从求解径向薛定谔方程出发

$$\begin{cases}\left[\dfrac{d^2}{dr^2}+K^2-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l^{(1)}(r)=0 & (r>a)\\ \left[\dfrac{d^2}{dr^2}+k^2-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l^{(2)}(r)=0 & (r>a)\end{cases}\tag{15.8.2}$$

此处 $\chi_l^{(1)}$ 和$\chi_l^{(2)}$ 分别是$r<a$ 和$r>a$ 时的解. $\chi_l^{(1)}$ 和$\chi_l^{(2)}$的一般形式为

$$\begin{aligned}\chi_l^{(1)}&=A_lr\mathrm{j}_l(Kr)+B_lr\mathrm{n}_l(Kr)\\ \chi_l^{(2)}&=C_lr\mathrm{j}_l(kr)+D_lr\mathrm{n}_l(kr)\end{aligned}\tag{15.8.3}$$

其中 $\mathrm{j}_l$ 和 $\mathrm{n}_l$ 是球贝塞尔函数. $A_l$、$B_l$、$C_l$ 和$D_l$ 为常数.

$$\begin{cases}\mathrm{j}_0(x)=\dfrac{\sin x}{x}, & \mathrm{n}_0(x)=-\dfrac{\cos x}{x}\\ \mathrm{j}_1(x)=\dfrac{\sin x}{x^2}-\dfrac{\cos x}{x}, & \mathrm{n}_1(x)=-\dfrac{\cos x}{x^2}-\dfrac{\sin x}{x}\end{cases}\tag{15.8.4}$$

由于径向波函数 $R_l(r)=\chi_l(r)/r$ 在原点($r=0$)处正则，我们取(15.8.3)中的 $B_1=0$. 这样在内部区域($r>a$)中我们有

$$R_l(r)=A_l\mathrm{j}_l(Kr)\tag{15.8.5}$$

相移 $\delta_l$ 现在可以通过计算$R_l(r)$的对数导数得到(见(15.25)和(15.26))

$$\tan\delta_l=\frac{k\mathrm{j}'_l(ka)-\gamma_l\mathrm{j}_l(ka)}{k\mathrm{n}'_l(ka)-\gamma_l\mathrm{n}_l(ka)}\tag{15.8.6}$$

此处，$\gamma_l=\left(\dfrac{1}{R_l}\dfrac{dR_l}{dr}\right)\Big|_{r=a}$. 将(15.8.5)中的 $R_l(r)$代入(15.8.6)并利用(15.8.4)，我们得到

$$\begin{cases}\gamma_0=K\cot(Ka)-\dfrac{1}{a} & (l=0)\\ \gamma_1=\dfrac{K^2a}{1-Ka\cot(Ka)}-\dfrac{2}{a} & (l=1)\end{cases}\tag{15.8.7}$$

对于 $l=0$，

$$\tan\delta_0=\frac{k\left(\dfrac{ka\cos(ka)-\sin(ka)}{(ka)^2}\right)-\gamma_0\dfrac{\sin(ka)}{ka}}{k\left(\dfrac{ka\sin(ka)+\cos(ka)}{(ka)^2}\right)+\gamma_0\dfrac{\cos(ka)}{ka}}\tag{15.8.8}$$

在极限 $ka\to0$ 下，(15.8.8)成为

$$\tan\delta_0\approx-\frac{\gamma_0ka^2}{1+\gamma_0a},\quad ka\ll1\tag{15.8.9}$$

同理，

$$\tan\delta_1\approx-\frac{(ka)^3}{3}\frac{1-\gamma_1a}{2+\gamma_1a}\qquad ka\gg1\tag{15.8.10}$$

此处 $\gamma_0$ 和 $\gamma_1$ 由(15.8.7)给出. 注意：除非 $\gamma_0a=-1$ 或 $\gamma_1a=-2$，$\delta_0$ 和 $\delta_1$ 在 $k\to0$ 时都为 0，且有

$\delta_1 \ll \delta_0 \ll 1$.

(b)共振散射就是相移变得非常大时的散射. s 波的共振散射($ka \ll 1, l=0$)由(15.8.7)和(15.8.9)给出. 此即, $1+\gamma_0 a=0 \Rightarrow Ka\cot(Ka)=0$,共振条件为

$$Ka = (2n+1)\frac{\pi}{2} \qquad (n=1,2,\cdots) \tag{15.8.11}$$

同理, p 波($ka \ll 1, l=1$)的共振散射条件为 $2+\gamma_1 a=0 \Rightarrow Ka\cot(Ka)=\pm\infty$,此即

$$Ka = n\pi \qquad (n=1,2,\cdots) \tag{15.8.12}$$

(c)总截面为

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=n}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{15.8.13}$$

除了 $\gamma_0 a=-1$ 或 $\gamma_1 a=-2$ 之外(见(15.8.9)和(15.8.10)), $\delta_0$ 和 $\delta_1$ 在 $k\to 0$ 时都为 0. 由于总截面的表达式中有一个 $1/k^2$ 因子,只有 $l=0$ 的分波对于总截面有贡献[注:在 $k\to 0$ 时!]. 这样,对于远离共振的情况($ka \ll 1, \delta_1 \ll \delta_0 \ll 1$),我们得到

$$\sigma_T \approx \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi\gamma_0^2 a^4}{(1+\gamma_0 a)^2} = 4\pi a^2\left(1-\frac{\tan(Ka)}{Ka}\right)^2 \tag{15.8.14}$$

其中 $K=\sqrt{k_0^2+k^2} \neq (2n+1)\frac{\pi}{2a}$.

**15.9** 考虑题 15.8 中的位势. (a)给出 s 波共振散射($ka \ll 1, l=0$)对应的微分截面 $d\sigma/d\Omega$; (b)给出 p 共振散射($ka \ll 1, l=1$)对应的微分截面 $d\sigma/d\Omega$.

**解答** (a) 由题(15.8),我们有

$$\begin{cases} \tan\delta_0 = -\dfrac{\gamma_0 ka^2}{1+\gamma_0 a} \\ \gamma_0 a = Ka\cot(Ka) - 1 \end{cases} \tag{15.9.1}$$

此处 $K=\sqrt{k_0^2+k^2}=k_0\left(1+\frac{k^2}{k_0^2}\right)^{1/2} \approx k_0\left(1+\frac{k^2}{2k_0^2}\right)$在共振点附近 $1+\gamma_0 a=0$, $\delta_0$ 的值并不小. 利用(15.9.1)和等式 $\sin^2\delta_0 = 1/(1+\cot^2\delta_0)$,我们得到

$$\sin^2\delta_0 = \frac{(ka)^2(\gamma_0 a)^2}{(ka)^2(\gamma_0 a)^2+(1+\gamma_0 a)^2} \tag{15.9.2}$$

对于 $ka \ll 1$ 的情况,将 $\gamma_0(K)$在 $K=k_0$ 处展开成泰勒级数

$$\gamma_0(K) = \gamma_0\big|_{K=k_0} + \frac{\partial\gamma}{\partial K}\bigg|_{K=k_0}(K-k_0)+\cdots \tag{15.9.3}$$

此处 $K-k_0=\frac{1}{2}\left(\frac{k}{k_0}\right)^2$. 应用(15.9.1)我们给出 $Ka$ 的领头项, $\gamma_0=\alpha_0+\beta_0 k^2$,其中

$$\begin{cases} \alpha_0 = k_0\cot(k_0 a) - \dfrac{1}{a} \\ \beta_0 = \dfrac{1}{2k_0}\left[\cot(k_0 a) - \dfrac{k_0 a}{\sin^2(k_0 a)}\right] \approx -\dfrac{a}{2} \end{cases} \tag{15.9.4}$$

由此

$$1+\gamma_0 a \approx 1+\alpha_0 a+\beta_0 ak^2 = k_0 a\cot(k_0 a) - \frac{(ka)^2}{2} \tag{15.9.5}$$

将(15.9.5)代入(15.9.2),我们最后得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{k^2a^2+\left[\xi_0-\dfrac{(ka^2)}{2}\right]^2} \quad (l=0) \tag{15.9.6}$$

其中 $ka \ll 1$, $\xi_0 = k_0 a\cot(k_0 a)$. 在共振点附近 $|\xi_0| \ll 1$, $d\sigma/d\Omega$ 在 $\xi_0=1$ 和 $l=0$ 的取值由图 15-4 画

出.

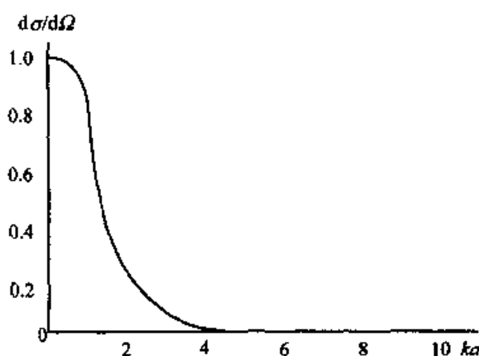



图 15-4

(b) 由题 15.8,我们得到

$$\begin{cases}\tan\delta_1 = \dfrac{(ka)^3}{3}\dfrac{1-\gamma_1 a}{2+\gamma_1 a} \\ \gamma_1 a = \dfrac{K^2a^2}{1-Ka\cot(Ka)}-2\end{cases} \tag{15.9.7}$$

此时我们有

$$\sin^2\delta_1 = \frac{1}{1+\left[\dfrac{2+\gamma_1 a}{1-\gamma_1 a}\right]^2\dfrac{9}{(ka)^6}} \tag{15.9.8}$$

此处 $2+\gamma_1 a=0$. 重复(a)的计算,我们得到

$$K = k_0+\frac{1}{2}\left(\frac{k}{k_0}\right)^2,\ \gamma_1(K)\approx \alpha_1+\beta_1 k^2 \tag{15.9.9}$$

在共振点附近系数 $\alpha_1$ 和 $\beta_1$ 为

$$\begin{cases}\alpha_1 = -k_0\tan(k_0 a)-\dfrac{2}{a} \\ \beta_1 \approx -\dfrac{a}{2}\end{cases} \tag{15.9.10}$$

由此得

$$2+\gamma_1 a = 2+\alpha_1 a+\beta_1 ak^2 = -ka\tan(k_0 a)-\frac{(ka)^2}{2}\equiv \xi_1-\frac{(ka)^2}{2} \tag{15.9.11}$$

此处 $ka\ll 1$, $|\xi_1|\leqslant 1$. p 波共振散射的贡献为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{9}{k^2}\cos^2\theta\sin^2\delta_l \tag{15.9.12}$$

将(15.9.8)代入(15.9.12)并利用(15.9.11),我们得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{9k^4a^6\cos^2\theta}{(ka)^6+\left[\xi_1-\dfrac{(ka)^2}{2}\right]^2}\quad (l=1) \tag{15.9.13}$$

**15.10** 应用 Born 近似,计算中心对称场中的散射相移 $\delta_l$.

**解答** Born 近似下中心对称场中的散射振幅由下式给出:

$$f^B(\theta) = -\frac{1}{k}\int_0^\infty r\sin(kr)U(r)dr \tag{15.10.1}$$

这个近似在势场足够弱时成立,此时所有的相移 $\delta_l\ll 1$. $f(\theta)$可用 $\delta_l$ 表达为

$$f^B(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{15.10.2}$$

或简化为

$$f^B(\theta) \approx \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\delta_l \mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{15.10.3}$$

将(15.10.3)式乘上 $\mathrm{P}_l(\cos\theta)$并积分(应用勒让德多项式的正交性关系),我们得到

$$\int_{-1}^{1} f^B(\theta)\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{d}(\cos\theta) \approx +\frac{2\delta_l}{k}$$

与(15.10.1)比较,我们得到

$$+\frac{2\delta_l}{k} = -\frac{1}{k}\int_0^{\infty} r\sin(kr)U(r)\mathrm{d}r\int_{-1}^{1}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{d}(\cos\theta) = -\int_0^{\infty} r^2 U(r)\mathrm{d}r\int_{-1}^{1}\frac{\sin(kr)}{kr}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{d}(\cos\theta)$$

$$= -\int_0^{\infty} 2\mathrm{j}_l^2(kr)r^2 U(r)\mathrm{d}r \tag{15.10.4}$$

这说明,在所有的相移都很小的情况下有

$$\delta_l^B = -k\int_0^{\infty} r^2 U(r)\mathrm{j}_l^2(kr)\mathrm{d}r \tag{15.10.5}$$

利用等式 $U=2\mu V/\hbar^2$ 和 $\mathrm{j}_l(r)=\left(\frac{\pi}{2r}\right)^{1/2}\mathrm{J}_{l+1/2}(r)$,最后得到

$$\delta_l^B = -\frac{\pi\mu k}{\hbar^2}\int_0^{\infty} rV(r)[\mathrm{J}_{l+1/2}(kr)]^2\mathrm{d}r \tag{15.10.6}$$

**15.11** 对于位势 $V(r)=V_0R\delta(r-R)$:(a)在 Born 近似下计算 $f(\theta)$和 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$,并分别在高能散射和低能散射的情况下探讨计算的可行性;(b)计算与 Born 近似相关的所有相移 $\delta_l$;(c)找出散射主要是来自于 s 波散射的条件.计算此时的微分截面并与(a)中的结果相比较[注:假定 $V_0>0$].

**解答** (a) Born 近似下的散射振幅为

$$f^B(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}\int e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3 r \tag{15.11.1}$$

其中 $\mu$ 是粒子的质量而 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_f$ 为对应的动量转移.对于球对称的位势,角度积分总可以积出来,此时(15.11.1)成为

$$f^B(\theta) = -\frac{2\mu}{q\hbar^2}\int_0^{\infty} r\sin(qr)V(r)\mathrm{d}r \tag{15.11.2}$$

将 $V(r)=V_0R\delta(r-R)$代入(15.11.2),我们得到

$$f^B(\theta) = -\frac{2\mu V_0 R^2}{q\hbar^2}\sin(qR) \tag{15.11.3}$$

此处 $q=2k\sin(\theta/2)$, $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}$这样

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f^B(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2 V_0^2 R^4}{\hbar^4 q^2}\sin^2(qR) \tag{15.11.4}$$

Born 近似在散射势能够当作微扰时适用.此即

$$\frac{2\mu}{\hbar^2 k}\left|\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r' e^{ikr'}V(r')\sin kr'\right| \ll 1 \tag{15.11.5}$$

在本题中,适用条件为

$$\frac{2\mu|V_0|R}{\hbar^2\cdot k}|e^{ikR}\sin kR| \ll 1 \tag{15.11.6}$$

我们来研究与 $kR$ 的取值相关的两个极限过程

$$\text{I}\quad \frac{2\mu V_0 R}{\hbar^2 k} = \frac{2V_0 R}{\hbar v} \ll 1 \quad (\text{高能})$$

$$\text{II}\quad \frac{2\mu V_0 R^2}{\hbar^2} \ll 1 \qquad (\text{低能}, kR \ll 1) \tag{15.11.7}$$

由于$|\sin(kR)|\leqslant 1$, $|\sin(kR)/kR|\leqslant 1$,第一个条件比第二个条件来得弱.等式(15.11.7I)给出了Born近似在高能下成立的条件.等式(15.11.7II)给出了Born近似在低能近似下的成立条件.我们由(15.11.4)和(15.11.5)式看到,在低能极限($ka\to 0$)下,Born散射截面是各向同性的.

(b)注意(题(15.10))到Born近似要求所有的相移都相对较小($\delta_l\approx\sin\delta_l\ll 1$),我们得到

$$\delta_l=-\frac{\pi\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty rV(r)[\mathrm{J}_{l+1/2}(kr)]^2\mathrm{d}r=-\frac{\pi\mu R^2V_0}{\hbar^2}[\mathrm{J}_{l+1/2}(kR)]^2 \tag{15.11.8}$$

利用贝塞尔函数的渐近表示

$$\begin{aligned}&\mathrm{I}\quad \mathrm{J}_{l+1/2}(x)_{x\to\infty}\to\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin(x-\pi l/2)\\&\mathrm{II}\quad \mathrm{J}_{l+1/2}(x)_{x\to 0}\to\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{x^{l+1/2}}{(2l+1)!!}\end{aligned} \tag{15.11.9}$$

我们将重新得到(a)中的结果(15.11.7).将(15.11.9I)代入(15.11.8),我们对于任意的$kR$得到

$$|\delta_l|<\frac{\pi\mu R^2V_0}{\hbar^2}\frac{2}{\pi kR}\ll 1 \tag{15.11.10}$$

这个条件与(15.11.7I)相同.同理将(15.11.9I)代入(15.11.8),我们对于$kR\ll 1$得到

$$\delta_l\approx\frac{\pi\mu R^2V_0}{\hbar^2}\frac{2}{\pi}\frac{(kR)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2} \tag{15.11.11}$$

而$\delta_0\gg\delta_l$就与条件(15.11.7II)相合.

(c)由(15.11.11),我们得到在$kR\ll 1$时,$\delta_0\gg\delta_l$.这个结论与由分波法得到的结果相同,它说明对于有限力程的势散射,散射振幅的主要贡献来自$l<kR$的分波,此处$R$为势场的力程.对于s波散射应用(15.11.11),我们得到

$$\delta_0\approx\sin\delta_0\approx-\frac{2\mu R^3V_0k}{\hbar^2} \tag{15.11.12}$$

微分截面的领头项为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{1}{k^2}|\mathrm{e}^{i\delta_0}\sin\delta_0|^2=\frac{4\mu^2R^6V_0^2}{\hbar^2} \tag{15.11.13}$$

正如前面的讨论所期待的那样,(15.11.4)和(15.11.12)在极限$qR\to 0$下吻合.此时s波近似和Born近似都给出与角度和入射粒子能量无关的微分截面.

**15.12**　一个质量为$\mu$的粒子被一个半径$R$内的球对称的排斥势散射

$$V(r)=\begin{cases}V_0, & r\leqslant R\\0, & r\geqslant R\end{cases}$$

(a)应用Born近似计算低能情况下的总散射截面;(b)应用分波法重新计算$\sigma_T$,只考虑s波的贡献.

**解**　(a) Born近似下的散射振幅为

$$f_k^B(\theta)=-\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\frac{4\pi}{q}\int_0^\infty\sin(qr)r\mathrm{d}r=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2q}\left[\frac{\sin(qR)}{q^2}-\frac{R\cos(qR)}{q}\right] \tag{15.12.1}$$

在$qR\to 0$时,我们得到各向同性的截面

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^B}{\mathrm{d}\Omega}=|f_k^B(\theta)|^2=\frac{4\mu^2V_0^2R^6}{9\hbar^4} \tag{15.12.2}$$

总截面为

$$\sigma_T^B=\int\frac{\mathrm{d}\sigma^B}{\mathrm{d}\Omega}\mathrm{d}\Omega=\frac{16\pi\mu^2V_0^2R^6}{9\hbar^4} \tag{15.12.3}$$

(b)在$E\to 0$时考虑s波散射足矣.为了计算相移$\delta_0$,我们考虑$\chi_0(r)$满足的薛定谔方程

$$\begin{cases}\left[\dfrac{d^2}{dr^2}+\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}\right]\chi_0^1(r)=0 & \Rightarrow \chi_0^1(r)=A\sin(kr+\delta_0), \quad r>R\\ \left[\dfrac{d^2}{dr^2}+\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_0)\right]\chi_0^2(r)=0 & \Rightarrow \chi_0^2(r)=B\sinh(kr\sqrt{(V_0/E)-1}), \quad r\leqslant R\end{cases}$$

(15.12.4)

此处 $k=(2\mu E/\hbar^2)^{1/2}$, $V_0\ll E$.这些解满足边界条件

$$\chi_0^1(R)=\chi_0^2(R),\quad \chi_0^{'(1)}(R)=\chi_0^{'(2)}(R) \tag{15.12.5}$$

此即

$$\begin{cases}A\sinh(kR+\delta_0)=B\sinh(KR)\\ A\cos(kR+\delta_0)=B\cosh(KR)\end{cases} \tag{15.12.6}$$

其中 $K=k[(V_0/E)-1]^{1/2}\approx k(V_0/E)^{1/2}$,由此

$$\tan(KR+\delta_0)\approx(E/V_0)^{1/2}\tanh(KR) \tag{15.12.7}$$

由 $kR\ll1$,

$$\begin{cases}\delta_0=(E/V_0)^{1/2}\tanh(KR)-kR\\ f_0(\theta)=\dfrac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0\end{cases} \tag{15.12.8}$$

最后,总截面由下式给出:

$$\sigma_T^0\approx\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\approx\frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2=4\pi R^2\left[1-\frac{\tanh(KR)}{KR}\right]^2 \tag{15.12.9}$$

注意:(15.12.3)和(15.12.9)只在力程非常短($kR\ll1$)时相合.尽管两种方法都能导致各向同性的微分截面,Born 近似却是不满足光学定理的.

**15.13** 粒子被位势 $V(r)=g/r^2$ 散射,$g$ 是一个正常数.(a)写出径向波动方程并给出其正规解;(b)证明相移由下式给出:

$$\delta_l=\frac{\pi}{2}\left[l+\frac{1}{2}-\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu g}{\hbar^2}}\right] \tag{15.13.1}$$

(c) 在散射角固定时给出截面与能量的依赖关系;(d)在 $2\mu g/\hbar^2\ll1$ 时计算 $\delta_l$ 并证明微分截面为

$$\frac{d\sigma}{d\theta}=\frac{\pi^3}{2\hbar^2}\frac{g^2\mu}{E}\cot\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{15.13.2}$$

此处 $E$ 是散射粒子的能量;(e)利用 Born 近似计算微分截面并与前面得到的结果比较.

**解答**　(a) 径向波动方程为

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+k^2-U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_{kl}(r)=0 \tag{15.13.3}$$

其中 $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, $U=2\mu g/\hbar^2r^2$, $\phi_l=R(l)Y_l^m=\chi_{kl}(r)Y_l^m$.代入已知的位势,我们得到

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+k^2-\frac{1}{r^2}\left[\frac{2\mu g}{\hbar^2}+l(l+1)\right]\right)\chi_{kl}(r)=0 \tag{15.13.4}$$

在 $g=0$ 时,(15.13.4)的解由自由球面波给出

$$\chi_{kl}^0(r)=\sqrt{\frac{2k^2r^2}{\pi}}j_l(kr)_{r\to\infty}\sim\frac{\sin(kr-\pi l/2)}{kr} \tag{15.13.5}$$

对于 $R(r)=\chi_{kl}/r$ 的渐近条件为

$$R_{kl}(r) \sim \frac{\sin(kr + \pi l/2 + \delta_l)}{kr} = \frac{\sin(kr - \pi\tilde{l}/2)}{kr} \tag{15.13.6}$$

此处 $\tilde{l}$ 由下式给出:

$$\tilde{l}(\tilde{l}+1) = l(l+1) + \frac{2\mu g}{\hbar^2} \tag{15.13.7}$$

(b) 比较(15.13.6)的两边,我们得到

$$\delta_l = (l - \tilde{l})\frac{\pi}{2} \tag{15.13.8}$$

其中 $\tilde{l}$ 由二次方程(15.13.7)解出

$$\tilde{l} = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4\left[l(l+1) + \frac{2\mu g}{\hbar^2}\right]} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) + \frac{2\mu g}{\hbar^2}}$$

$$= -\frac{1}{2} \oplus \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu g}{\hbar^2}},\ \mathrm{sign}(+) \to \tilde{l} > 0 \tag{15.13.9}$$

将(15.13.8)代入(15.13.7)可得(15.13.1).

(c) 截面由下式给出:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)\right|^2 \tag{15.13.10}$$

由于 $\delta_l$ 与 $k$ 无关(在本题是这样的),我们有

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{1}{k^2} \propto \frac{1}{E}\bigg|_{\theta=\text{const}} \tag{15.13.11}$$

(d)对于 $2\mu g/\hbar^2 \ll 1$,利用(15.13.1),导出

$$\delta_l = \frac{\pi}{2}l + \frac{1}{2} - \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 + \frac{2\mu g}{\hbar^2\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}\right]^{1/2}$$

$$\approx \frac{\pi}{2}l + \frac{1}{2} - \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 + \frac{\mu g}{\hbar^2\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}\right] = -\frac{\pi}{2}\frac{\mu g}{\hbar^2\left(l + \frac{1}{2}\right)} \ll 1 \tag{15.13.12}$$

将其代入(15.13.10),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\pi}{2}\frac{\mu g}{\hbar^2(l+1/2)}P_l(\cos\theta)\right|^2$$

$$= \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\pi\mu g}{\hbar^2}P_l(\cos\theta)\right|^2 = \frac{\pi^2\mu^2 g^2}{\hbar^4 k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta)\right|^2 \tag{15.13.13}$$

为了求出级数的和,我们利用 $P_l(\cos\theta)$的生成函数

$$\sum_{l=0}^{\infty}P_l(x)t^l = \frac{1}{\sqrt{1 - 2tx + t^2}} \Rightarrow \sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2\sin(\theta/2)} \tag{15.13.14}$$

这样

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi^2\mu^2 g^2}{4\hbar^4 k^2\sin^2(\theta/2)} = \frac{\pi^2\mu g^2}{g\hbar^2 E}\frac{1}{\sin^2(\theta/2)} \tag{15.13.15}$$

应用 $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$,最后我们得到

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{\pi^2\mu g^2}{4\hbar^2 E}\frac{\sin\theta}{\sin^2(\theta/2)} = \frac{\pi^3\mu g^2}{2\hbar^2 E}\frac{\sin\theta}{1 - \cos\theta} \tag{15.13.16}$$

它与(15.13.2)相合.

(e)在 Born 近似下,散射振幅为

$$f_k(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}U(r')d^3r' = -\frac{2\mu g}{4\pi\hbar^2}\int\frac{1}{r^2}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}d^3r' = -\frac{2\mu g}{\hbar^2}\int_0^{\infty}\frac{\sin(qr)}{qr}dr$$

$$= -\frac{\pi\mu g}{\hbar^2 q^2} \qquad [q = 2k\sin(\theta/2)] \tag{15.13.17}$$

这样

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_t(\theta,\phi)|^2 = \frac{\pi^2\mu^2 g^2}{4\hbar^4 k^2}\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \tag{15.13.18}$$

与(15.13.15)相合.由于所有的相移都很小,这个结果是可以预料的(见(15.27)).

**15.14** 计算粒子被一个完全吸收球散射时的总截面.

**解答** 带有吸收的散射过程能够用引入复数散射势来唯象地描述:$V(r)=V_R-\mathrm{i}V_I$, $V_I\geqslant 0$. 这样,我们得到复数相移 $\delta_l=\xi_l+\mathrm{i}\eta_l$,这样 $|s_l|=|\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\delta_l}|\leqslant 1$. 此处 $|s_l|=0$ 对应于完全吸收的情况(注意,$|s_l|=1$ 对应于实的相移,此即无吸收的情况).引入复数相移后总截面被分成分别由下式给出的两部分:

$$\sigma_T=\sigma_{el}+\sigma_{abs}$$

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+l)|1-s_l|^2 \tag{15.14.1}$$

和*

$$\sigma_{abs} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+l)(1-|s_l|^2)^2 \tag{15.14.2}$$

注意到对于有限力程 $a$ 的位势,有**

$$l(l+1) > (ka)^2 \Rightarrow \delta_l = 0 \to s_l = 1 \tag{15.14.3}$$

在本题中

$$\begin{cases} s_l = 0, \ l(l+1) < (ka)^2 \\ s_l = 1, \ l(l+1) > (ka)^2 \end{cases} \tag{15.14.4}$$

定义 $L(L+1)=(ka)^2$ 并将(15.14.3)中的 $s_l$ 代回到(15.14.1)中,得到

$$\sigma_{el} = \sigma_{abs} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{L}(2l+1) = \frac{\pi}{k^2}L(L+1) = \frac{\pi}{k^2}(ka)^2 = \pi a^2 \tag{15.14.5}$$

最后有

$$\sigma_T = 2\pi a^2 \tag{15.14.6}$$

这个结果是经典结果的两倍,却是硬球散射结果的一半.

**15.15** 两个 $He^+$ 离子互相散射.离子之间的相互作用为 Coulomb 相互作用,离子的核自旋为 0.(a)写出质心系中的散射振幅;(b)计算总自旋为 0(单态)对应的微分截面;(c)对于总自旋 1 的三重态,重复(b)中的工作;(d)对于非极化离子系统的微分截面是什么?

**解答** (a) Coulomb 相互作用的散射振幅为(见题 15.19)

$$f(\theta) = \frac{n}{2k\sin^2(\theta/2)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\ln(\sin^2(\theta/2))+\mathrm{i}\pi+2\mathrm{i}\eta_0} \tag{15.15.1}$$

此处 $\eta_0\equiv\arg\Gamma(1+\mathrm{i}n)$, $n=\mu Z'z\dfrac{e^2}{\hbar^2 k}$, $\mu=\dfrac{m_{He}}{2}$ 是约化质量,$k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, $Z=Z'=1$.

(b) 由于核自旋为 0,两个离子是全同 Fermi 子(每个都带有由电子贡献的 1/2 自旋).如果总自旋为 0,系统处于反对称自旋态,轨道波函数是对称的

---

* 原著对这两个公式的导出没有做任何解释.实际上,这两个公式在前面并未给出.原因是原著前面得到的截面的分波展开公式(15.21)是在入射球面波和出射球面波的流强相同的弹性散射的情况下导出的.而吸收过程是典型的非弹性散射过程.

需要把(15.21)改成在非弹性散射情况下也适用的公式,严格的分析表明(见标准教科书)只需要将(15.21)中的 $\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}$ 改成模不一定为 1 的复数 $S_l$ 就可以了.这样我们可以得到(15.14.1)和(15.14.2)——译者注.

** 这实际上是分波法的适用条件在非弹性散射情况下的推广.读者可将其当做一个附加假定——译者注.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=0} = |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 = \frac{n^2}{4k^2}\left|\frac{e^{-2in\ln(\sin(\theta/2))}}{\sin^2(\theta/2)}+\frac{e^{-2in\ln(\cos(\theta/2))}}{\cos^2(\theta/2)}\right|^2$$

$$= \frac{n^2}{4k^2}\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}+\frac{2\cos[n\ln\tan^2(\theta/2)]}{\sin^2(\theta/2)\cos^2(\theta/2)}\right] \tag{15.15.2}$$

(c) 与(b)中的讨论类似,只不过此时自旋波函数是对称的而轨道波函数是反对称的

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=1} = |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2 = \frac{n^2}{4k^2}\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}-\frac{2\cos[n\ln\tan^2(\theta/2)]}{\sin^2(\theta/2)\cos^2(\theta/2)}\right] \tag{15.15.3}$$

(d) 对于非极化离子流,总自旋为 0 的概率为 1/4,总自旋为 1 的概率是 3/4.这样

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=0}+\frac{3}{4}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=1} \tag{15.15.4}$$

将(15.15.2)和(15.15.3)的结果代入后得到

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{n^2}{4k^2}\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}-\frac{\cos[n\ln\tan^2(\theta/2)]}{\sin^2(\theta/2)\cos^2(\theta/2)}\right] \tag{15.15.5}$$

注意:在低能极限下 $n\gg1$,(15.15.5)与经典结果差别很大.

**15.16** 两个自旋为 1/2 的全同粒子之间的相互作用势为

$$V(r)=V(r)[(3)1+\sigma_1\cdot\sigma_2]（此式中 \sigma 应为矢量）$$

此处 $\sigma_i$ 是泡利矩阵而 1 是自旋空间里的单位算符(见第七章). $V(r)$由下式给出:

$$V(r)=\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{4\mu r^2}, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}\qquad \left(\mu=\frac{m}{2}\right)$$

(a)将算符$[(3)1+\sigma_1\cdot\sigma_2]$作用到单态和三重态上我们分别得到什么结果? (b) 两个粒子在 $kR\ll1$ 时发生低能散射,$(k=\sqrt{(2\mu E/\hbar^2)})$. 对于总自旋 $s=0$,对散射振幅(和截面)有决定性的贡献的相移是什么? (c) 在 $s=1$ 时,这个有决定性的贡献的相移是什么? (d) 在极限 $kR\ll1$ 时计算(b)中的相移和截面;(e) 在极限 $kR\ll1$ 时计算(c)中的相移和截面;(f) 对于非极化粒子流,计算对应的截面.

**解** (a) 系统的总自旋为 $S=\hbar\sigma/2$,其中 $\sigma=\sigma_1+\sigma_2$.这样

$$\sigma^2=\sigma_1^2+\sigma_2^2+2\sigma_1\cdot\sigma_2 \tag{15.16.1}$$

由泡利矩阵的性质

$$\sigma_1^2=\sigma_1\cdot\sigma_1=\sigma_{1x}^2+\sigma_{1y}^2+\sigma_{1z}^2=(3)1 \tag{15.16.2}$$

及其 $\sigma_2^2=\sigma_2\cdot\sigma_2=(3)1$ 对于单态 $\sigma^2|单态\rangle=0$;利用(15.16.1)我们得到

$$(\sigma_1\cdot\sigma_2)|单态\rangle=\frac{1}{2}(0-3-3)1|单态\rangle=-(3)1|单态\rangle \tag{15.16.3}$$

对于三重态 $\sigma^2|三重态\rangle=8|三重态\rangle$.同理可得

$$(\sigma_1\cdot\sigma_2)|三重态\rangle=\frac{1}{2}(8-3-3)1|三重态\rangle=1|三重态\rangle \tag{15.16.4}$$

最后我们有

$$\begin{aligned}&\text{I}\quad [(3)1+\sigma_1\cdot\sigma_2]|单态\rangle=(3-3)|单态\rangle=0\\ &\text{II}\quad [(3)1+\sigma_1\cdot\sigma_2]|三重态\rangle=(3+1)|三重态\rangle=4|三重态\rangle\end{aligned} \tag{15.16.5}$$

(b) 对于总自旋 $s=0$,系统处于反对称的单态.由于总波函数必须反对称(Fermi 子),轨道波函数必须是对称的.一般来说,只有偶数阶的分波对对称的轨道波函数有贡献.在 $V=0$ 的情况下,所有的相移必须为 0.

(c) 对于总自旋 $s=1$,系统处于三重态之一.自旋波函数是对称的而轨道波函数必须反对称.这样只有奇数阶的分波有贡献.在 $kR\ll1$ 时,主要的贡献来自相移 $\delta_1$.

(d) 我们来对 $s=0$ 的单态计算相移 $\delta_0$.径向波函数 $R_{kl}(r)=\chi_{kl}(r)/r$ 由求解下面的方程得出

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V+k^2\right]\chi_{kl}(r)=0 \tag{15.16.6}$$

在(15.16.6)中令 $V=0,l=0$ 可解出 $R_{k0}(r)$

$$R_{k0}(r)=\frac{\sin(kr)}{kr}=j_0(kr) \tag{15.16.7}$$

$\gamma_0$ 的对数导数为

$$\gamma_0=\frac{1}{R_0}\frac{dR_0}{dr}\bigg|_{r=R}=k\cot(kR)-\frac{1}{R}=-\frac{kj_1(kR)}{j_0(kR)} \tag{15.16.8}$$

这里已经用到了等式 $j_0'(x)=-j_1(x)$由于 $V=0$,我们期待所有的相移都为0.特别地,我们可以直接验证

$$\tan\delta_0=\frac{kj_0'(kR)-\gamma_0j_0(kR)}{kn_0'(kR)-\gamma_0n_0(kR)}=\frac{-kj_1(kR)-kj_1(kR)}{kn_0'(kR)-\gamma_0n_0(kR)}=0 \tag{15.16.9}$$

和$(\sigma)^{s=0}=0$.

(e) 对于 $s=1$ 的情况,主要贡献来自 $\delta_1$.将 $l=1$ 和 $V=4V(r)=\hbar^2/\mu r^2$(见(15.16.2)和(15.16.5)),代入(15.16.6),我们得到

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{2}{r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\hbar^2}{\mu r^2}+k^2\right]\chi_{k1}(r)=0 \tag{15.16.10}$$

此时我们得到 $R_{k1}(r)=R_{k0}(r)=j_0(kR)$和 $\gamma_1=\gamma_0$.相移 $\delta_1$ 为

$$\tan\delta_1=\frac{kj_1'(kR)-\gamma_1j_1(kR)}{kn_1'(kR)-\gamma_1n_1(kR)} \tag{15.16.11}$$

在极限 $kR\to0$ 时,

$$j_0(x)\approx1-\frac{x^2}{3!},\ j_1(x)=\frac{x}{3},\ n_1(x)\approx-\frac{1+x^2/2}{x^2},\ j_1'(x)\approx\frac{1}{3},\ n_1'(x)\approx+\frac{2}{x^3} \tag{15.16.12}$$

将 $\gamma_1R\approx-(kR)^2/3$ 代入(15.16.11),得到 $\delta_1\approx\frac{1}{6}(kR)^3\ll1$.$\delta_1$ 对应的散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{3}{k}e^{i\delta_1}\sin\delta_1P_1(\cos\theta) \tag{15.16.13}$$

在反对称化后我们得到

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=1}=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2=|2f(\theta)|^2=\frac{36}{k^2}\sin^2\delta_1\cos^2\theta \tag{15.16.14}$$

最后令 $\sin\delta_1\approx\tan\delta_1$,我们有

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=1}=R^2(kR)^4 \tag{15.16.15}$$

(f) 非极化流对应的散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{4}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=0}+\frac{3}{4}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=1}=\frac{3}{4}R^2(kR)^4 \tag{15.16.16}$$

**15.17** 考虑两个质量为 $m$ 的无自旋全同粒子的散射.相互作用势与两个粒子之间的距离 $r$ 相关,且由下式给出:

$$V(r)=\begin{cases}-\dfrac{\pi^2\hbar^2}{4m}\left(\dfrac{1}{R}+\dfrac{1}{a}\right)^2, & r<R\\ 0, & r>R\end{cases} \tag{15.17.1}$$

此处 $R \ll a$ 是常数,(a)在低能极限下计算相移 $\delta_0$

$$kR \ll \frac{R}{a} \ll 1,\ k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \tag{15.17.2}$$

此处 $E$ 是质心系中的能量而 $\mu$ 是约化质量.(b)计算总截面.(c)对于处于单态的两个自旋为 1/2 的 Fermi 子重复上面的计算.(d)对于非极化的自旋 1/2 的 Fermi 子,计算总截面.

**解**　(a) 两个质量为 $m$ 的全同粒子的约化质量为 $\mu = m/2$. 记

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}\left(\dfrac{1}{R}+\dfrac{1}{a}\right)^2 \equiv -V_0, & r<R \\ 0, & r>R \end{cases} \tag{15.17.3}$$

并定义如下的常数:

$$K = \sqrt{\frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2+\frac{1}{4}\pi^2\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{a}\right)^2},\ k_0 \equiv \frac{\pi}{2}\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{a}\right) \tag{15.17.4}$$

我们得到(见题 15.8)

$$\tan\delta_0 = -\frac{\gamma_0 kR^2}{1+\gamma_0 R} \quad (kR \ll 1) \tag{15.17.5}$$

其中 $\gamma_0$ 由 $\gamma_0 = K\cot(KR) - \frac{1}{R}$ 给出.将 $\gamma_0$ 代入(15.17.5)后得到

$$\tan\delta_0(k) = -KR + \frac{k}{K}\tan(KR) \tag{15.17.6}$$

在(15.17.2)的极限下,$K \to k^0$. 此时

$$KR \to k_0 R \approx \frac{\pi}{2}\left(1+\frac{R}{a}\right),\ \frac{k}{K} \approx \frac{2kR}{\pi}\left(1-\frac{R}{a}\right),\ \tan(KR) \approx \tan\left[\frac{\pi}{2}\left(1+\frac{R}{a}\right)\right] \approx -\frac{a}{R} \tag{15.17.7}$$

在(15.17.6)中保留 $kR$ 和 $R/a$ 的领头项,得到

$$\tan\delta_0 \approx -kR\left[1+\frac{2}{\pi}\frac{a}{R}-\frac{2}{\pi}\right] \tag{15.17.8}$$

这里由 $R/a \ll 1$ 可导出 $\tan\delta_0 = -\frac{2ka}{\pi} \ll 1$.

(b) s 波近似下的散射振幅为

$$f_0(\theta) = \frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0 \tag{15.17.9}$$

对于无自旋全同粒子.散射振幅是对称的.微分截面为

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = |f_0(\theta)+f_0(\pi-\theta)|^2 = \frac{4}{k^2}\sin^2\delta_0 \tag{15.17.10}$$

将 $\delta_0$ 代入到 $\delta_0 = -(2ka)/\pi$ 中并对 $d\Omega$ 积分后得到

$$\sigma_0 = \frac{64}{\pi}a^2 \tag{15.17.11}$$

(c) 对于处于自旋单态的 Fermi 子,轨道波函数是对称的.这样(b)中得到的结果并不改变

$$(\sigma_0)^{s=0} = \frac{64}{\pi}a^2 \tag{15.17.12}$$

(d) 对于自旋为 1/2 的非极化 Fermi 子,自旋取 0 的概率为 1/4,自旋取 1 的概率为 3/4

$$\sigma_0 = \frac{1}{4}(\sigma_0)^{s=0} + \frac{3}{4}(\sigma_0)^{s=1} \tag{15.17.13}$$

由于 $s=1$ 的轨道波函数是反对称的,$\delta_0$ 没有贡献,$(\sigma_0)^{s=1}=0$. 由此

$$\sigma_0 = \frac{1}{4}(\sigma_0)^{s=0} = \frac{16}{\pi}a^2 \tag{15.17.14}$$

**15.18** 一个质量为 $m_1$，速度为 $v_1$ 的粒子与一个质量为 $m_2(m_2>m_1)$ 且在实验室系里静止的粒子发生非弹性散射.(图 15-5)，并变成两个质量分别为 $m_3$ 和 $m_4$ 的粒子，$m_1+m_2=m_3+m_4$. 在散射过程中，有 $m_1+m_2$ 系统的内能 $Q$ 转化成为 $m_3+m_4$ 系统的动能.(a)给出 $m_3$ 在质心系和实验室系中的散射角 $\theta$ 和 $\theta_0$ 之间的关系；(b)给出质心系的截面 $d\sigma(\theta)/d\Omega$ 和实验室系截面 $d\sigma(\theta_0)/d\Omega$ 之间的关系.

**解答** (a) 由质心系的定义和动量守恒定律，我们得到

$$\begin{cases} m_1 v_1 = m_2 v_2 \\ m_3 v'_1 = m_4 v'_2 \end{cases} \tag{15.18.1}$$

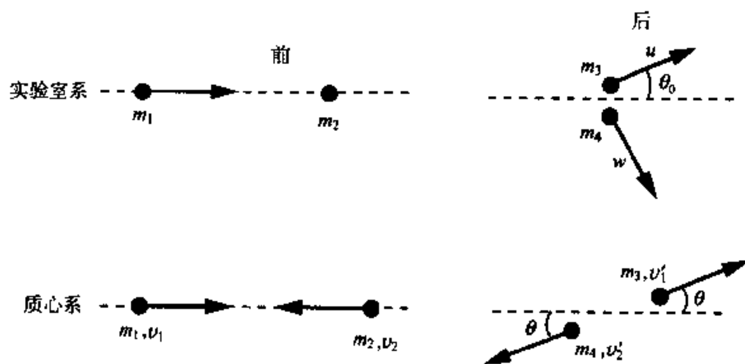



图 15-5

同理，由质心系中的能量守恒

$$\begin{cases} E = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 \\ E + Q = \frac{1}{2} m_3 v_1'^2 + \frac{1}{2} m_4 v_2'^2 \end{cases} \tag{15.18.2}$$

其中 $E$ 是质心系中的内部动能，$Q$ 是散射中系统机械能的增量. 令 $v_1 = v - V, v_2 = -V$，此处 $V$ 是质心系相对于实验室系的速度，我们得到

$$V = \frac{m_1}{m_1+m_2} v, \ v_1 = \frac{m_2}{m_1+m_2} v \tag{15.18.3}$$

由于质心系里的总动量为 0，我们有 $u\cos\theta_0 = v'_1\cos\theta + V$ 和 $u\sin\theta_0 = v'_1\sin\theta$. 这样

$$\tan\theta_0 = \frac{\sin\theta}{\cos\theta + V/v'_1} \equiv \frac{\sin\theta}{\cos\theta + \gamma} \tag{15.18.4}$$

其中 $\gamma = V/v'_1$.

(b) 由(15.18.1)和(15.18.2)得到

$$V_2 = \frac{m_1}{m_2} v_1, \quad v'_2 = \frac{m_3}{m_4} v'_1 \tag{15.18.5}$$

$$\frac{E}{E+Q} = \frac{m_1 m_4}{m_3 m_2}\left(\frac{m_1+m_2}{m_3+m_4}\right)\frac{v_1^2}{v_1'^2} = \frac{m_1 m_4}{(m_1+m_2)^2 m_3}\frac{v^2}{v_1^2} \tag{15.18.6}$$

由于

$$\gamma^2 = \frac{V^2}{v_1'^2} = \frac{m_1 m_3}{m_2 m_4}\frac{E}{E+Q} \tag{15.18.7}$$

两个参考系的截面之间的关系为

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{\text{Lab}} \sin\theta_0 d\theta_0 d\phi_0 = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{\text{CM}} \sin\theta d\theta d\phi \tag{15.18.8}$$

由 $\phi^{\text{CM}} = \phi^{\text{Lab}}$ 和(15.18.4)得到

$$\begin{cases}\cos^2\theta_0 = \dfrac{(\cos\theta+\gamma)^2}{1+2\gamma\cos\theta+\gamma^2} \\ \sin\theta_0\mathrm{d}\theta_0(1+2\gamma\cos\theta+\gamma^2)^{3/2} = |1+\gamma\cos\theta|\sin\theta\mathrm{d}\theta\end{cases} \tag{15.18.9}$$

这样我们有

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma_0}{\mathrm{d}\Omega}\right)^{\mathrm{Lab}} = \frac{(1+2\gamma\cos\theta+\gamma^2)^{3/2}}{|1+\gamma\cos\theta|}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)^{\mathrm{CM}} \tag{15.18.10}$$

**15.19**　(a)在抛物柱坐标下写出带有电荷 $Ze$ 和 $Z'e$ 的两个彼此之间有 Coulomb 相互作用的粒子的薛定谔方程;(b)将薛定谔方程的解写成下式:

$$u(\xi,\eta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}v(\xi,\eta) \tag{15.19.1}$$

证明对于出射波 $v(\xi,\eta)$在极限 $r\to\infty$时不依赖于坐标 $\eta_0$;(c)将 $V(\xi)$展开成合流超几何函数并找到其在原点附近的正则解;(d)计算微分截面并证明其与 Rutherford 截面相同.

**解答**　(a) 质心系中的薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{ZZ'e^2}{r}\right]u(r) = Eu(r) \tag{15.19.2}$$

其中 $E=\hbar^2k^2/2\mu$,$\mu$ 是约化质量.在抛物柱坐标下

$$\begin{cases}\xi = r(1-\cos\theta) = r-z \\ \eta = r(1+\cos\theta) = r+z, \\ \phi = \phi\end{cases} \quad \begin{cases}x = \sqrt{\xi\eta}\cos\phi \\ y = \sqrt{\xi\eta}\sin\phi \\ z = \dfrac{1}{2}(\eta-\xi)\end{cases} \tag{15.19.3}$$

拉普拉斯算符为

$$\nabla^2 = \frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right]+\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{15.19.4}$$

由此,(15.19.2)能写成下式:

$$\left\{\frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)-\frac{\mu ZZ'e^2}{h_2}\right]+\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+k^2\right\}u(r) = 0 \tag{15.19.5}$$

(b) 由解的方位对称性我们得到 $u=u(\xi,\eta)$.在极限 $r\to\infty$时出射波有 $r^{-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$的形式.因此有

$$u(\xi,\eta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}v(r-z,r+z)_{r\to\infty}\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}v(r-z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}v(\xi) \tag{15.19.6}$$

等式(15.19.6)给出如下形式的分离变量解

$$\eta(\xi,\eta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}v(\xi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\eta/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\xi/2}v(\xi) \tag{15.19.7}$$

(c) 将(15.19.7)代入(15.19.5),薛定谔方程变成 $v(\xi)$满足的方程

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\xi^2}+(1-\mathrm{i}k\xi)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\xi}-nkv = 0 \qquad \left(n\equiv\frac{\mu ZZ'e^2}{\hbar^2k}\right) \tag{15.19.8}$$

此方程具有下式:

$$z\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}z^2}+(b-z)\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}z}-aF = 0 \tag{15.19.9}$$

其解为合流超几何函数 $F(a,b,z)$,其中 $z=\mathrm{i}k\xi$,$a=-\mathrm{i}n$,$b=1$

$$v(\xi) = AF(-\mathrm{i}n,1,\mathrm{i}k\xi) \tag{15.19.10}$$

在原点处正则的解 $F(a,b,z)$的渐近行为为

$$F_{z\to\infty}\to\Gamma(b)\left[\frac{\mathrm{i}(-z)^{-a}}{\Gamma(b-a)}\left(1+\frac{a(a-b)}{z}\right)-\frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{z}z^{a-b}}{\Gamma(a)}\left(1+\frac{(1-a)(b-a)}{z}\right)+\cdots\right] \tag{15.19.11}$$

代人 $z=\mathrm{i}k\xi, a=-\mathrm{i}n, b=1$ 后我们得到

$$v(\xi)_{\xi\to\infty} \to A\frac{\mathrm{e}n^{\pi/2}}{\Gamma(1+\mathrm{i}n)}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\ln k\xi}+f_c(\theta)\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k\xi-n\ln 2kr)}\right] \tag{15.19.12}$$

其中

$$f_c(\theta)=\frac{\Gamma(1+\mathrm{i}n)}{\mathrm{i}\Gamma(-\mathrm{i}n)}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\ln\sin^2(\theta/2)}}{2k\sin^2(\theta/2)} \tag{15.19.13}$$

由此

$$u_{r\to\infty}\to\frac{A\mathrm{e}^{n\pi/2}}{\Gamma(1+\mathrm{i}n)}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kz+n\ln k(r-z)]}+f_c(\theta)\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kr-n\ln 2kr]}] \tag{15.19.14}$$

(d) 注意！ $u$ 不具有下面的形式：

$$u_{r\to\infty}\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{15.19.15}$$

这是因为 Coulomb 势的下降速度还不够快. 不过我们仍然可以将截面公式推广到这一情况*. 于是我们有

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|f(\theta)|^2=\frac{n}{4k^2\sin^2(\theta/2)} \tag{15.19.16}$$

这就是著名的 Rutherford 公式.

**15.20** 质子-中子散射振幅由下式给出：

$$f(\theta)=\langle\xi_f|(A+B\sigma^p\cdot\sigma^N)|\xi_i\rangle \tag{15.20.1}$$

其中 $A$ 和 $B$ 是"常数"[注：$A$ 和 $B$ 只要不是自旋空间的矩阵就行了，还可以与空间坐标相关.]，$\sigma$ 是泡利矩阵，$\{|\xi_i\rangle, |\xi_f\rangle\}$ 是系统的自旋初态和末态，$|\xi\rangle_{i,f}\in\{|+_p+_N\rangle, |+_p-_N\rangle, |-_p+_N\rangle, |-_p+_N\rangle\}$ · (a) 计算在全部 16 种可能情况下的散射振幅；(b) 构造 $|+\rangle_N\to|+\rangle_N$ 和 $|+\rangle_N\to|-\rangle_N$ 对应的微分截面，假定探测器无法分辨质子的自旋；(c) 计算下列散射截面：|单态⟩→|单态⟩，|三重态⟩→|单态⟩，|三重态⟩→|三重态⟩.

**解答**　(a) 算符 $\sigma^p\cdot\sigma^N=\sigma_x^p\sigma_x^N+\sigma_y^p\sigma_y^N+\sigma_z^p\sigma_z^N$ 分别作用在质子和中子态上. 例如

$$\begin{aligned}\langle+|_p\langle+|_N(A+B\sigma^p\cdot\sigma^N)|+\rangle_p|+\rangle_N &= A+B(\langle+|_p\sigma_x|+\rangle_p\langle+|_N\sigma_x|+\rangle_N+\\ &\langle+|_p\sigma_y|+\rangle_p\langle+|_N\sigma_y|+\rangle_N+\langle+|_N\sigma_z|+\rangle_N\langle+|_p\sigma_z|+\rangle_p)\end{aligned} \tag{15.20.2}$$

由 $\sigma_x|+\rangle=|-\rangle, \sigma_y|+\rangle=i|-\rangle, \sigma_z|+\rangle=|+\rangle$，和自旋态的正交性 $\langle+|-\rangle=0$ 得到

$$\langle+|_p\langle+|_N(A+B\sigma^p\cdot\sigma^N)|+\rangle_p|+\rangle_N=A+B \tag{15.20.3}$$

同理

$$\begin{aligned}\langle+|_p\langle+|_N(A+B\sigma^p\cdot\sigma^N)|+\rangle_p|-\rangle_N &= B[\langle+|\sigma_x|+\rangle\langle+|\sigma_x|-\rangle+\\ &\langle+|\sigma_y|+\rangle\langle+|\sigma_y|-\rangle+\langle+|\sigma_z|+\rangle\langle+|\sigma_z|-\rangle]=0\end{aligned} \tag{15.20.4}$$

全部 16 个可能的结果在表 15-3 中给出

表 15-3

| | $\langle+\|_p\langle+\|_N$ | $\langle-\|_p\langle+\|_N$ | $\langle+\|_p\langle-\|_N$ | $\langle-\|_p\langle-\|_N$ |
|---|---|---|---|---|
| $\langle+\|_p\langle+\|_N$ | $A+B$ | 0 | 0 | 0 |
| $\langle-\|_p\langle+\|_N$ | 0 | $A-B$ | $2B$ | 0 |
| $\langle+\|_p\langle-\|_N$ | 0 | $2B$ | $A-B$ | 0 |
| $\langle-\|_p\langle-\|_N$ | 0 | 0 | 0 | $A+B$ |

* 请参看标准教科书中的相关讨论——译者注.

(b) 我们考虑入射的质子处于一般的自旋态 $\alpha|+\rangle_p+\beta|-\rangle_p(|\alpha|^2+|\beta|^2=1)$ 的情况.由于探测器无法探测到末态质子的自旋(不同自旋的贡献不相干)

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{|+\rangle_N\to|+\rangle_N}=|f_+|^2+|f_-|^2 \tag{15.20.5}$$

其中 $f_\pm$ 分别对应于质子末态处于 $|\pm\rangle_p$ 时的贡献.应用表 15-3 中的结果,对于过程 $|+\rangle_N\to|-\rangle_N$(这里原文中的右矢中两个都是正号)我们得到

$$\begin{pmatrix}f_+\\f_-\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A+B & 0\\0 & A-B\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}\equiv M\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix} \tag{15.20.6}$$

由此

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{|+\rangle_N\to|+\rangle_N}=(\alpha^*\beta^*)M^\dagger M\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}=(\alpha^*\beta^*)\begin{pmatrix}|A+B|^2 & 0\\0 & |A-B|^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}$$

$$=|\alpha|^2|A+B|^2+|\beta|^2|A-B|^2$$

假定入射质子非极化——即认为在初态中质子处于 $|+\rangle_p$ 和 $|-\rangle_p$ 中的概率都为 1/2.将代入(15.20.6)我们得到

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{|+\rangle_N\to|+\rangle_N}=\frac{1}{2}(|A+B|^2+|A-B|^2)=|A|^2+|B|^2 \tag{15.20.7}$$

此结果能够写成

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{|+\rangle_N\to|+\rangle_N}=\frac{1}{2}\mathrm{tr}(M^\dagger M) \tag{15.20.8}$$

这个结果对于自旋 1/2 的非极化粒子都成立.对过程 $|+\rangle_N\to|-\rangle_N$ 应用(15.20.8),将(15.20.6)中的矩阵 $M$ 改成

$$\begin{pmatrix}f_+\\f_-\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 2B\\0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}\equiv M\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix} \tag{15.20.9}$$

这立即给出

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{|+\rangle_N\to|-\rangle_N}=\frac{1}{2}(0+4|B|^2)=2|B|^2 \tag{15.20.10}$$

(c) 考虑处于自旋为 0 的单态中的系统

$$|\text{单态}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_p|-\rangle_N-|-\rangle_p|+\rangle_N) \tag{15.20.11}$$

由此,散射振幅为

$$f|_{\text{单态}\rangle\to|\text{单态}\rangle}=\frac{1}{2}(f|_{+-\rangle\to|+-\rangle}-f|_{+-\rangle\to|-+\rangle}-f|_{-+\rangle\to|+-\rangle}+f|_{-+\rangle\to|-+\rangle})$$

$$=\frac{1}{2}[A-B-2B-2B+(A-B)]=A-3B \tag{15.20.12}$$

如果注意到在单态和三重态中算符 $\sigma_p\cdot\sigma_n$ 的本征值分别为 $-3$ 和 1,我们就可以省略大量的代数演算

$$(\sigma_N\cdot\sigma_p)|\text{单态}\rangle=-3|\text{单态}\rangle$$

$$(\sigma_N\cdot\sigma_p)|\text{三重态}\rangle=|\text{三重态}\rangle \tag{15.20.13}$$

散射振幅为

$$f(\text{单态}\to\text{单态})=\langle\text{单态}|(A+B\sigma_N\cdot\sigma_p)|\text{单态}\rangle=A-3B$$

$$f(\text{三重态}\to\text{三重态})=\langle\text{三重态}|(A+B\sigma_N\cdot\sigma_p)|\text{三重态}\rangle=A+B$$

$$f(\text{单态}\to\text{三重态}) = \langle\text{三重态}|(A + B\sigma_N \cdot \sigma_p)|\text{单态}\rangle = 0 \tag{15.20.14}$$

散射截面为

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{单态}\to\text{单态}} = |A - 3B|^2$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{三重态}\to\text{三重态}} = |A + B|^2 \tag{15.20.15}$$

**15.21** 考虑一维定态薛定谔方程，$V(x)\neq 0$ 只在 $|x| < x_0$ 时成立.(a)证明对于薛定谔方程的任意解，概率流都是一个与位置 $x$ 无关的常数；(b)波函数的渐近行为可以写成下式：

$$\begin{cases}\phi_L(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, x \ll -x_0 \\ \phi_R(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, x \gg +x_0\end{cases} \tag{15.21.1}$$

其中 $A$、$B$、$C$、$D$ 是与散射矩阵 $S$ 相关的复常数：

$$\begin{pmatrix}B\\C\end{pmatrix} = S\begin{pmatrix}A\\D\end{pmatrix}$$

证明 $S$ 是酉矩阵.

**证 明** (a) 定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + (V - E)\phi = 0 \tag{15.21.2}$$

由于 $V$ 和 $E$ 都是实的，$\phi$ 同样满足共轭方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi^* + (V - E)\phi^* = 0$$

将这些方程分别乘上 $\phi^*$ 和 $\phi$ 并相减，得到

$$\phi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + (V - E)\phi\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi^* + (V - E)\phi^*\right)\phi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}(\phi^*\nabla^2\phi - (\nabla^2\phi^*)\phi) = 0 \tag{15.21.3}$$

或即

$$-i\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot[\phi^*\nabla\phi - (\nabla\phi^*)\phi] = -i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{J} = 0 \tag{15.21.4}$$

此即

$$\frac{dJ(x)}{dx} = 0, J(x) = \frac{\hbar}{2im}\left[\phi^*\frac{d\phi}{dx} - \phi\frac{d\phi^*}{dx}\right] \tag{15.21.5}$$

(b)在前一段中我们已经证明了对于定态薛定谔方程任意的解 $\phi$ 对应的概率流守恒并与 $x$ 无关.对于 $x\to-\infty$，

$$\frac{2im}{\hbar}J_L = (A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx})(ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}) - (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})(-ikA^*e^{-ikx} + ikB^*e^{ikx})$$

$$= 2ik(|A|^2 - |B|^2) \tag{15.21.6}$$

即

$$J_L = \frac{\hbar k}{m}(|A|^2 - |B|^2) \tag{15.21.7}$$

同理，对于 $x\to+\infty$

$$J_R = \frac{\hbar k}{m}(|C|^2 - |D|^2) \tag{15.21.8}$$

由流守恒 $J_L = J_R$ 得到

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2 - |D|^2 \Rightarrow |B|^2 + |C|^2 = |A|^2 + |D|^2 \tag{15.21.9}$$

这说明矩阵 S 是酉矩阵

$$S^\dagger S = 1 \tag{15.21.10}$$

## 补 充 习 题

**15.22** 一个质量为 $m_1$ 的粒子被一个在实验室系里静止的质量为 $m_2$ 的粒子弹性散射.(a)给出 $m_2$ 在质心系和实验室系内的散射角之间的关系;(b)给出 $m_1$ 在质心系和实验室系内的散射角之间的关系;(c)在下列条件下,实验室系中 $m_1$ 的散射角的取值范围是什么?

i. $m_1/m_2<1$, ii. $m_1/m_2=1$, iii. $(m_1/m_2)>1$.

**答案**

(a) $\tan\theta_2 = \frac{\sin\theta}{1-\cos\theta}\left(0\leqslant\theta<\pi\to\tan\theta_2\geqslant0\to0\leqslant\theta_2\leqslant\frac{\pi}{2}\right)$;

(b) $\tan\theta_1 = \frac{\sin\theta}{\cos\theta+\gamma}\left(\gamma=\frac{m_1}{m_2}\right)$;

(c) i. $\gamma<1\to0\leqslant\theta_1\leqslant\pi$; ii. $\gamma=1\to\theta_1=\frac{\pi}{2}\to0\leqslant\theta_1\leqslant\frac{\pi}{2}$; iii. $\gamma>1\to0\leqslant\theta_1\leqslant\theta_1^{\max}=\arcsin(1/\gamma)$

**15.23** 一个质量为 $m_1$ 的粒子被一个在实验室系里静止的质量为 $m_2$ 的粒子弹性散射.(a)对于粒子 $m_1$,给出在质心系内的散射截面 $\mathrm{d}\sigma(\theta,\phi)/\mathrm{d}\Omega$ 和实验室系内散射截面 $\mathrm{d}\sigma_0(\theta_0,\phi_0)/\mathrm{d}\Omega$ 之间的关系;(b)假定 $m_1=m_2$.给出实验室系里 $m_1$ 的微分截面.假定已经给出了质心系中的微分截面;(c)计算(b)中的总截面,并验证总截面与参考系选择无关.

**答案**

(a) $\frac{\mathrm{d}\sigma_0}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{(1+\gamma^2+2\gamma\cos\theta)^{3/2}}{|1+\gamma\cos\theta|}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$; $\left(\gamma=\frac{m_1}{m_2}\right)$;

(b) $\frac{\mathrm{d}\sigma_0}{\mathrm{d}\Omega} = 4\cos\theta_0\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\left(0<\theta_0\leqslant\frac{\pi}{2}, 0<\phi_0\leqslant2\pi\right)$;

(c) $\sigma_0 = \int\frac{\mathrm{d}\sigma_0}{\mathrm{d}\Omega_0}\mathrm{d}\Omega_0 = \frac{4\sigma}{4\pi}\int_0^{\pi/2}\cos\theta_0\sin\theta_0\mathrm{d}\theta_0\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi_0 = \sigma$

**15.24** 假定系统有方位角对称性,给出散射振幅与散射截面之间的关系.

**答案** $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega = |f_k(\theta)|^2$.

**15.25** 应用 Fermi 金律计算一个粒子(质量为 $m$,能量为 $E$)从初态 $|p_i\rangle$ 到末态 $|p_f\rangle$ 的跃迁概率密度(单位时间内).证明截面 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega = W(p_i,p_f)/J_i$,其中 $W$ 是跃迁概率密度,$J_i$ 是概率流密度,$J_i = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\sqrt{\frac{3E_i}{m}}$,与 Born 近似的结果相同.

**15.26** 考虑位势 $V=-V_0, r\leqslant a; V=0, r>a$.证明其 s 束缚态$(1=0, E<0)$满足量子化条件:$\tan(Ka) = -K/k$,其中

$$K^2 = (k_0^2+k^2), k_0 = \left(\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\right)^{1/2}, k = \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

**15.27** 证明题 15.26 中 s 波的散射相移$(l=0, E=0)$为 $\delta_0 = \xi(k) - kr_0$,其中 $Ka = +(K/k)\tan[\xi(k)]$.

**15.28** 给出题 15.26 中低能共振散射($ka\ll1$)的条件并证明在共振点附近

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \approx \frac{1}{k^2+k_0^2\cot^2(k_0a)}$$

**15.29** 考虑位势 $V=-V_0, r<a; V=0, r>a$.(a)证明对于 $q=2k\sin(\theta/2)$,散射振幅 $f(\theta)$ 为

$$f(\theta)=\frac{\mu V_0}{\hbar^2}\ \frac{2}{q}\left(\frac{\sin(Rq)}{q^2}-\frac{R\cos(Rq)}{q}\right) \tag{15.29.1}$$

(b) 证明在极限 $Rq\ll 1$ 下,微分截面是一个与 $k$ 和 $\theta$ 都无关的常数;

(c) 考虑位势 $V(r)=B\delta(r)$. 用 Born 近似计算微分截面. 给出常数 $B$ 使得(b)和(c)中的结果相合.

**答案**

(c) $\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{\mu^2B^2}{4\pi^2\hbar^4}$; $B=\frac{4\pi}{3}V_0R^3$.

**15.30** 考虑位势 $V=-V_0, r\leqslant a; V=0, r>a$. 给出 $\delta_0=\pi$ 的条件.

**答案**

$ka\ll 1\tan(ka)=ka; k\equiv\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$.

**15.31** 导出光学定理 $\sigma_{total}=4\pi\mathrm{Im}f_k(0)/k$. 提示:利用 $f(\theta)$ 的分波展开和 $\sigma_{el}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left|e^{2i\delta_l}-1\right|^2$,

$\sigma_{abs}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\left|e^{2i\delta_l}\right|)^2$

**15.32** 考虑两个质量同为 $m$ 的全同粒子. 被散射的粒子能量为 $E_0=\hbar^2k^2/2m$, 靶粒子静止. 粒子之间的相互作用势为 $V(r)=V_0/r^2$, $r$ 为粒子间相对坐标. (a)对于任意的 $l$, 计算相移 $\delta_l$; (b)给出质心系中的微分截面 $d\sigma(\theta)/d\Omega$; (c)给出在初始时靶粒子静止的实验室系里的微分截面 $d\sigma_0(\theta_0)/d\Omega$.

**答案**

(a) $\delta_l=\frac{\pi}{2}\left[l-\frac{1}{2}\left(-1+\sqrt{1+4[l(l+1)+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}]}\right)\right]$;

(b) $\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{16}{k^2}\left|\sum_{L=0}^{\infty}(4L+1)e^{i\delta_{2L}}\sin\delta_{2L}P_{2L}(\cos\theta)\right|^2$;

(c) $\frac{d\sigma(\theta_0)}{d\Omega}=4\cos\theta_0\ \frac{d\sigma(2\theta)}{d\Omega}$.

**15.33** (a)应用 Born 近似计算质量为 $\mu$ 的粒子被一个半径为 $a$, 深度为 $V_0$ 的球方势阱散射时的散射截面. 并在 $a\to 0, V_0\to\infty$ 但 $V_0a^3=C$, $C$ 为常数时计算其极限; (b)一个中子被另外一个中子散射, 中子的质量为 $m$. 假定中子之间的相互作用势满足(a)中的条件. 对于中子对处于单态和三重态的情况分别计算(质心系中的)散射振幅和散射截面(质心系中的).

**答案**

(a) $f(\theta)=\frac{3\mu C}{\hbar^2}\left[\frac{\sin(qa)-qa\cos(qa)}{(qa)^3}\right]$; $q=2k\sin(\theta/2)$; $\mu=\frac{m}{2}$; $f(\theta)_{qa\to 0}\to\frac{2}{3}\ \frac{\mu C}{\hbar^2}$;

(b) 单态 $f_s(\theta)=f(\theta)+f(\pi-\theta)=\frac{2}{3}\ \frac{mC}{\hbar^2}$; $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=0}=\frac{4}{9}\ \frac{m^2C^2}{\hbar^4}$.

三重态 $f_A(\theta)=f(\theta)-f(\pi-\theta)=0$; $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{s=1}=0$.

**15.34** 考虑两个处于基态的 He 原子的弹性散射. 假定 He 原子为半径为 $a$ 的不可穿越的球. 记 $\sigma_{43}, \sigma_{33}, \sigma_{44}$ 分别为($He^4, He^3$), ($He^3, He^3$)和($He^4, He^4$)散射对应的总截面. (a)应用分波法计算三种情况下的微分截面; (b)证明在 $ka\ll 1$ 时有下面的关系: $\sigma_{43}:\sigma_{33}:\sigma_{44}=1:1:4$.

**答案**

(a) $\tan\delta_l=\frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}, ka\ll 1\to-\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)[(2l-1)!!]^2}$; $f_l\equiv\frac{2l+1}{k}e^{i\delta_l}\sin\delta_l$

$\frac{d\sigma_{43}}{d\Omega}=\left|\sum_{l=0}^{\infty}f_lP_l(\cos\theta)\right|^2$; $\frac{d\sigma_{33}}{d\Omega}=\left|\sum_{l=0,\text{even}}^{\infty}f_lP_l(\cos\theta)\right|^2+3\left|\sum_{l=1,\text{odd}}^{\infty}f_lP_l(\cos\theta)\right|^2$

$\frac{d\sigma_{44}}{d\Omega}=4\left|\sum_{l=0}^{\infty}f_lP_l(\cos\theta)\right|^2$

(b) $\sigma_{43}=4\pi a^2$; $\sigma_{33}=2\pi a^2[2+3(ka)^4]$; $\sigma_{44}=16\pi a^2$.

# 第十六章 辐射的半经典处理

## 16.1 辐射与原子系统的相互作用

质量为 $m$,电荷为 $e$,自旋为 $\boldsymbol{S}$ 的带电粒子在外电磁场中的哈密顿算符为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{r})+e\phi-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.1}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 是矢势,$\phi$ 为标势而 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 是磁场.可以通过选择适当的规范条件来简化 $H$.在研究辐射问题时经常选用的规范为 Coulomb 规范.这个规范有时也被称为辐射规范或横规范.其形式为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0,\quad \phi=0 \tag{16.2}$$

在这种规范下的哈密顿算符为

$$H=\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]+\left[-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}\right]=H_0+H' \tag{16.3}$$

此处 $H_0$ 是未微扰哈密顿算符(无外场)而 $H'(t)$ 则是微扰哈密顿算符.对于辐射的半经典近似,我们假定 $\boldsymbol{A}^2$ 项很小并将其忽略(见题 16.2).此时

$$H'(t)=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.4}$$

这个近似称为低强度近似.

## 16.2 含时微扰论

在低强度近似下,$H'(t)$ 被当作一个时变的小微扰.设系统的初态为 $|i\rangle$,并于 $t=0$ 时加上微扰,$t$ 时刻系统处于 $|f\rangle$ 态的一阶概率振幅为

$$a_{fi}^{(1)}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\langle f|H'(t')|i\rangle\mathrm{d}t' \tag{16.5}$$

其中 $\hbar\omega_{fi}=E_f-E_i$.在半经典处理中,我们假定电磁场 $\boldsymbol{A}$ 由平面波描述

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)&=2|A_0|\hat{\varepsilon}\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\theta)=A_0\hat{\varepsilon}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]\\&\quad+A_0^*\hat{\varepsilon}\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]\end{aligned} \tag{16.6}$$

此处 $A_0=|A_0|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 为复数,$\hat{\varepsilon}$ 是极化方向的单位矢量,$\boldsymbol{k}$ 为波矢,$\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{k}=0$,(横规范).由此得到

$$a_{fi}^{(1)}(t)=-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\frac{T_{fi}^+}{\hbar}-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega}\frac{T_{fi}^-}{\hbar} \tag{16.7}$$

其中

$$\begin{cases}T_{fi}^+\equiv-\dfrac{e}{mc}\langle f|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}A_0[\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}+\mathrm{i}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\varepsilon})]|i\rangle\\[2ex] T_{fi}^-\equiv-\dfrac{e}{mc}\langle f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}A_0^*[\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\varepsilon})]|i\rangle\end{cases} \tag{16.8}$$

见题16.4.

## 16.3 跃迁速率

我们来研究跃迁振幅 $a_{fi}^{(1)}(t)$. 共振跃迁当外电磁场的频率接近于未微扰系统的特征频率(即 $\omega=\pm f_i$)时发生. 此时我们可以忽略由(16.7)式贡献的交叉项,并将跃迁概率分为共振吸收($\omega_{fi}>0$)和共振发射($\omega_{fi}<0$)两项. 吸收概率为

$$P_{fi}\cong\frac{T_{fi}^{+}\mid}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}-\omega)/2}\right\}^2,\quad \omega_{fi}>0 \tag{16.9}$$

(见题16.4)发射概率为

$$P_{fi}\cong\frac{|T_{fi}^{-}|}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}+\omega)/2}\right\}^2,\quad \omega_{fi}<0 \tag{16.10}$$

对于严格单色电磁场,跃迁概率与 $\omega\pm|\omega_{fi}|$ 的相关非常明显,且能导致不稳定的跃迁. 在考虑由初态 $|i\rangle$ 到连续末态 $|f\rangle$ 中的跃迁时,我们可以得到与时间线性相关的跃迁概率(跃迁速率为常数). 此时的跃迁速率可以由 Fermi 金律得到

$$W_{fi}^{\pm}=\frac{\mathrm{d}P^{\pm}(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|T^{\pm}|i\rangle|^2\rho(E_f=E_i\pm\hbar\omega) \tag{16.11}$$

其中 $\rho(E_f)$ 是末态密度. 同理,如果辐射场不是单色的,但是具有频谱 $u(\omega)$,跃迁速率为

$$W_{fi}=\frac{4\pi^2e^2}{m^2\hbar^2}\frac{u(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2}\langle f|\mathrm{e}^{\pm i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}[\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{p}\pm\mathrm{i}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})]|i\rangle|^2 \tag{16.12}$$

此处 $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$ 分别为初态和末态,正负号分别对应于吸收和发射的情况.

## 16.4 多极跃迁

在长波近似下,$\mathrm{e}^{\pm i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\approx1+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\cdots$,$T_{fi}^{\pm}$ 可以做如下的多极展开:

$$T_{fi}^{\pm}\approx\mathrm{i}m\omega_{fi}\langle f|\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle+\frac{\mathrm{i}}{2}\langle f|(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})|i\rangle$$

$$-\frac{m\omega_{fi}}{2}\langle f|(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{r})|i\rangle \tag{16.13}$$

(16.13)中的第一项对应于电偶极跃迁,第二项对应于磁偶极跃迁而第三项则对应于电四极跃迁. 在通常情况下,跃迁速率以电偶极项为主,此时的跃迁速率为

$$W_{fi}=\frac{4\pi^2e^2}{\hbar^2}u(\omega_{fi})|\langle f|\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2 \tag{16.14}$$

可是对于特定的态 $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$,$\langle f|\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle$ 可能为0. 这种跃迁称为禁戒跃迁. 对于各向同性的外电磁场,极化矢量随机取向. 对单位矢量 $\hat{\varepsilon}$ 的各个分量求平均,我们得到

$$W_{fi}=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}u(\omega_{fi})|\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2\equiv B_{fi}u(u_{fi}) \tag{16.15}$$

$B_{fi}$ 就是对于吸收和发射的爱因斯坦系数.

## 16.5 自发辐射

被激发的原子系统在无外电磁场时也会发生辐射. 自发辐射的速率在偶极近似下为

$$W_{fi}^{\mathrm{spon}}=\frac{4}{3}\frac{e^2}{\hbar}\frac{\omega_{fi}^3}{c^3}|\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2\equiv A_{fi} \tag{16.16}$$

此处 $A_{fi}$ 是对于自发辐射的爱因斯坦系数.

## 例 题 解 答

**16.1** 带电粒子在外电磁场中的运动由下面的哈密顿算符描述:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + e\phi \tag{16.1.1}$$

其中 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\phi(\boldsymbol{r},t)$ 为电磁势, $e$ 是电荷, $c$ 为光速. 证明含时薛定谔方程 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$ 在如下的规范变换下是不变的:

$$\begin{cases} \boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla\chi(\boldsymbol{r},t) \\ \phi \to \phi' = \phi - \dfrac{1}{c}\dfrac{\partial\chi}{\partial t} \\ \psi \to \psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\chi(\boldsymbol{r},t)/\hbar c}\psi \end{cases} \tag{16.1.2}$$

**解答**　在规范变换(16.1.2)下,薛定谔方程 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = H'\psi'$,有下式:

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(T\psi) &= \left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + e\phi'(\boldsymbol{r},t)\right]T\psi \\ &= \left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + e\phi - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right]T\psi \end{aligned} \tag{16.1.3}$$

由于

$$\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(T\psi) = T\left(\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\psi\frac{\partial\chi}{\partial t}\right) \tag{16.1.4}$$

和

$$\boldsymbol{p}(T\psi) = -\mathrm{i}\hbar\nabla(T\psi) = T\left(\boldsymbol{P}\psi + \frac{e}{c}\psi\nabla\chi\right) \tag{16.1.5}$$

(16.1.3)的右方等于

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)\cdot T\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi + T\left[V(\boldsymbol{r}) + e\phi - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right]\psi \\ &= T\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + e\phi - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right]\psi \end{aligned} \tag{16.1.6}$$

作为推论,(16.1.3)变成

$$T\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\psi = T\left(H - \frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\psi \tag{16.1.7}$$

将(16.1.7)用 $T^\dagger$ 左乘,我们得到 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$. 这就是在原来的规范下的薛定谔方程.

**16.2** 一个质量为 $m$,电荷为 $e$,自旋为 $\boldsymbol{S}$ 的原子中的电子与由 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 描述的外辐射场相互作用. 系统的哈密顿算符为

$$H = H_0 + H'(t) \tag{16.2.1}$$

此处 $H_0 = p^2/2m + V(\boldsymbol{r})$ 是原子的哈密顿算符, $H(t)$ 是与时间相关的微扰. (a)证明相互作用哈密顿算符能够写成

$$H'(t) = -\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 - \frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.2.2}$$

其中$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0,\phi=0,\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$;(b)在低强度极限下估计各微扰项的大小.

**解** (a) 电子在外电磁场内的哈密顿算符为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{r})+e\phi-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.2.3}$$

其中 $V(\boldsymbol{r})$是核的势场,$(\phi,\boldsymbol{A})$分别是电磁场的标势和矢势,$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 是磁场.由等式(16.2.3)导出

$$\begin{aligned}H&=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2+V(\boldsymbol{r})+e\phi-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}\\&=H_0+e\phi-\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}\end{aligned} \tag{16.2.4}$$

如果我们选取规范$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0,\phi=0$(横规范),上面的表达式还能简化.记 $\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$,并将$(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A})$作用到任意的 $\psi(\boldsymbol{r})$上,得到

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A})\psi(\boldsymbol{r})&=-\mathrm{i}\hbar\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x^\alpha}A_\alpha(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})=-\mathrm{i}\hbar\sum_{\alpha}^{3}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x^\alpha}A_\alpha\right)\psi+A_\alpha\frac{\partial}{\partial x^\alpha}\psi\right]\\&=-\mathrm{i}\hbar(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\psi+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\psi=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{16.2.5}$$

于是

$$H=H_0+H'(t)=H_0-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.2.6}$$

此处 $H_0$ 是原子的未微扰哈密顿算符,$H'(t)$是与时间相关的微扰.

(b) 举例说明:考虑一个类氢原子与角频率 $\omega=ck$ 的单色电磁场相互作用.此时,(16.2.6)中各项的大小可以由其在 $H_0$ 的未微扰态中的方均根值近似替代.定义如下的方均根值:

$$\begin{cases}A\equiv\sqrt{\langle\psi\mid\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}\mid\psi\rangle}\\p\equiv\sqrt{\langle\psi\mid\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}\mid\psi\rangle}\end{cases} \tag{16.2.7}$$

并用其来估计(16.2.6)中的三个微扰项

$$\begin{cases}H'_1=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{p}\\H'_2=\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2(\boldsymbol{r},t)\\H'_s=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)\end{cases} \tag{16.2.8}$$

此处$|\psi\rangle$是 $H_0$ 的使 $A\neq0,p\neq0$ 的本征态.考虑比值 $H'_2/H'_1$

$$\frac{H'_2}{H'_1}\approx\frac{e^2A^2}{eAcp}\approx\frac{eAp/mc}{p^2/m}\approx\frac{H'_1}{H_0} \tag{16.2.9}$$

在低强度极限下 $H'_1/H'_0$ 很小.由此,比值 $H'_2/H'_1$ 也很小.注意,在高强度近似下,辐射场可以达到原子内电场的数量级,$H'_2$ 可能会变得能与 $H'_1$ 相比.现在来考虑比值 $H'_s/H'_1$,由于 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}\sim kA$ 我们得到

$$\frac{H'_s}{H'_1}\approx\frac{\hbar B}{Ap}\approx\frac{\hbar kA}{Ap}\approx\frac{\hbar}{p\lambda} \tag{16.2.10}$$

由测不准关系,$\hbar/p$ 是玻尔轨道的量级(对于氢原子,$a_0=0.5$Å),而对于光源 $\lambda\approx5000$Å 由此得到 $H'_s/H'_1\approx10^{-4}\ll1$.

注意:(16.2.9)和(16.2.10)的结果说明在低强度近似下 $H'_2$ 和 $H'_s$ 可以忽略.但是这个结论在下列条件下不成立.

1. 禁戒跃迁:此时 $H'_1$ 的偶极矩阵元为0而 $H'_1$ 变成与 $H'_s$ 同阶的量.
2. 严格禁戒跃迁:此时 $H'_1$ 的矩阵元恒等于0.

**16.3** 一个角频率为 $\omega=ck$ 的单色电磁场由下面的矢势描述:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=A_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]+A_0^*\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)] \tag{16.3.1}$$

此处 $\boldsymbol{A}_0=\boldsymbol{W}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 是复极化矢量，$\boldsymbol{k}$ 为波矢，$\boldsymbol{W}_0\cdot\boldsymbol{k}=0$. (a)计算与此矢势相关的电场 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ 和磁场 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$. (b)计算 Poynting 矢量 $\boldsymbol{S}=\frac{c}{4\pi}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$，并验证

$$u=\frac{I}{c}=\frac{\omega^2}{2\pi c^2}\mid\boldsymbol{W}_0\mid^2 \tag{16.3.2}$$

其中 $I$ 是辐射强度而 $u$ 是能量密度.

**解答**　(a) 电场 $\boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$ 由下式给出：

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\boldsymbol{r},t)&=\frac{\mathrm{i}\omega}{c}\mathbf{A}_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]-\frac{\mathrm{i}\omega}{c}\mathbf{A}_0^*\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]\\&=\mathrm{i}k\mathbf{A}_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]-\mathrm{i}k\mathbf{A}_0^*\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]\\&=-2k\boldsymbol{W}_0\sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\theta)\end{aligned} \tag{16.3.3}$$

磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 为

$$\begin{aligned}\mathbf{B}&=\mathrm{i}\boldsymbol{k}\times A_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}_0^*\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]\\&=-2\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{W}_0\sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\theta)\end{aligned} \tag{16.3.4}$$

(b) 辐射强度定义为 Poynting 矢量 $\boldsymbol{S}=\frac{c}{4\pi}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$ 的时间平均值. 从(16.3.3)和(16.3.4)我们得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}&=\frac{c}{\pi}k\boldsymbol{W}_0\times(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{W}_0)\sin^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\theta)\\&=\frac{\omega^2}{\pi c}\mid\boldsymbol{W}_0\mid^2\frac{\boldsymbol{k}}{k}\sin^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\theta)\end{aligned} \tag{16.3.5}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{k}}=\boldsymbol{k}/|\boldsymbol{k}|$ 是传播方向上的单位矢量. 在将 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r},t)$ 在一个振动周期内进行平均后得到

$$I=|\overline{S}|=\frac{\omega^2}{2\pi c}\mid\boldsymbol{W}_0\mid^2 \tag{16.3.6}$$

这里利用了 $\overline{\sin^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\theta)}=1/2$ 同理，能量密度对时间的平均为

$$u=\frac{1}{4\pi}\overline{(E^2+B^2)}=\frac{\omega^2}{2\pi c^2}\mid\boldsymbol{W}_0\mid^2 \tag{16.3.7}$$

从(16.3.6)和(16.3.7)我们得到

$$u=I/c=\frac{\omega^2}{2\pi c^2}\mid\boldsymbol{W}_0\mid^2 \tag{16.3.8}$$

此处 $|\boldsymbol{W}_0|^2$ 由题给出.

注意：由于 Poynting 矢量是辐射场的能流密度，辐射强度 $I$ 的定义为单位时间在 $\boldsymbol{k}$ 方向上单位面积上传播的能量. 这个量也与沿着 $\boldsymbol{k}$ 方向传播的光子数($\varepsilon=\hbar\omega$ 的能量量子数)有关. 应用(16.3.6)，我们得到光子的流强(单位时间通过单位面积的光子数)为

$$F=\frac{I}{\hbar\omega}=\frac{\omega}{2\pi\hbar c}\mid\boldsymbol{W}_0\mid^2 \tag{16.3.9}$$

**16.4**　一个质量为 $m$，电荷 $e=-|e|$，自旋为 $\boldsymbol{S}$ 的原子中的电子与一个角频率 $\omega=ck$ 的单色辐射场发生相互作用. 系统的哈密顿算符为

$$H=H_0+H'(t)=H_0-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{e}{mc}(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{S} \tag{16.4.1}$$

其中 $H'(t)$是一个小微扰(低强度极限),矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$由如下的平面波给出:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) &= 2\mid A_0\mid \hat{\varepsilon}\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\theta)\\ &= A_0\hat{\varepsilon}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]+A_0^*\hat{\varepsilon}\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]\end{aligned} \tag{16.4.2}$$

此处 $A_0=|A_0|e^{i\theta}$是一个复数,$\hat{\varepsilon}$是极化方向的单位矢量,$\boldsymbol{k}$ 是波矢,$\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{k}=0$(横规范).设$|i\rangle$和$|f\rangle$为未微扰哈密顿算符 $H_0$ 的两个分别对应于能级 $E_i$ 和$E_f$ 的两个本征态,$E_i\neq E_f$.假定微扰在 $t=0$ 时加上.计算共振跃迁$|i\rangle\to|f\rangle$对应的跃迁概率 $P_{fi}(t)$.

**解释**　我们考虑(16.4.1)中的哈密顿算符并将 $H'(t)$当作小的含时微扰.设系统的初态为$|i\rangle$,微扰在 $t=0$ 时加上,$t>0$ 时刻系统处于末态$|f\rangle$的一阶振幅为

$$\begin{aligned}a_{fi}^{(1)}(t) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t e^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\langle f\mid H'(t')\mid i\rangle\mathrm{d}t' = \frac{\mathrm{i}e}{mc\hbar}\int_0^t e^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\langle f\mid \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{p}\\ &\quad+\boldsymbol{S}\cdot[\nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)]\mid i\rangle\mathrm{d}t'\end{aligned} \tag{16.4.3}$$

其中 $\hbar\omega=E_f-E_i$(见第十章).代入(16.4.2)中的 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$并对 $\mathrm{d}t'$积分,我们得到

$$\begin{aligned}a_{fi}^{(1)}(t) &= \frac{\mathrm{i}e}{mc\hbar}\int_0^t\{e^{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)t'}\langle f\mid A_0e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}[\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}+\mathrm{i}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\varepsilon})]\mid i\rangle\\ &\quad+e^{\mathrm{i}(\omega_{fi}+\omega)t'}\langle f\mid A_0^*e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}[\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\varepsilon})]\mid i\rangle\}\mathrm{d}t'\end{aligned} \tag{16.4.4}$$

此即

$$a_{fi}^{(1)}(t) = -\frac{e^{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\frac{T_{fi}^+}{\hbar}-\frac{e^{\mathrm{i}(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega}\frac{T_{fi}^-}{\hbar} \tag{16.4.5}$$

此处我们定义

$$\begin{cases}T_{fi}^+\equiv-\dfrac{e}{mc}\langle f\mid e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}A_0[\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}+\mathrm{i}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\varepsilon})]\mid i\rangle\\ T_{fi}^-\equiv-\dfrac{e}{mc}\langle f\mid e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}A_0^*[\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{k}\times\hat{\varepsilon})]\mid i\rangle\end{cases} \tag{16.4.6}$$

等式(16.4.5)中包含如下形式的时间因子(见图 16-1):

$$\frac{e^{\mathrm{i}(\omega_{fi}\pm\omega)t}-1}{\omega_{fi}\pm\omega} = \mathrm{i}e^{\mathrm{i}(\omega_{fi}\pm\omega)t/2}\frac{\sin[(\omega_{fi}\pm\omega)t/2]}{(\omega_{fi}\pm\omega)/2} \tag{16.4.7}$$

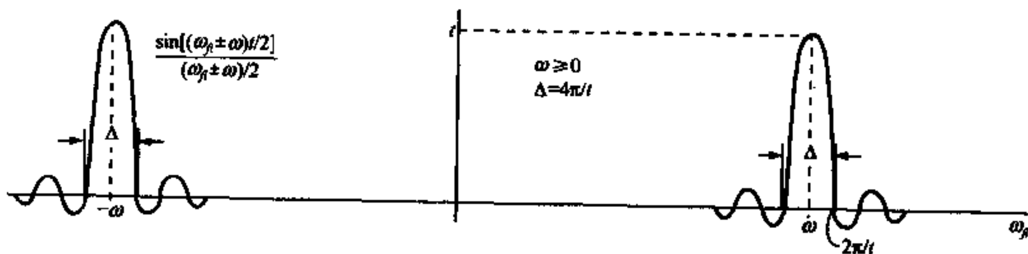



图 16-1

作为推论,跃迁概率 $P_{fi}(t)=|a_{fi}^{(1)}(t)|^2$ 在$|\omega-\omega_{fi}|<4\pi/t\equiv\Delta$(或$|\omega+\omega_{fi}|<\Delta$)时显著.在 $\Delta\ll 2|\omega_{fi}|$时,我们可以忽略 $P_{fi}(t)$中的交叉项并将两种共振跃迁分开:

1. 共振吸收($\omega_{fi}>0$)

$$P_{fi}(t)\cong\frac{|T_{fi}^+|^2}{\hbar^2}\left|\frac{\sin[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}-\omega)/2}\right|^2 \tag{16.4.8}$$

2. 共振发射($\omega_{fi}<0$)

$$P_{fi}(t) \cong \frac{|T_{fi}^{-}|^2}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fi}+\omega)t/2]}{(\omega_{fi}+\omega)/2}\right\}^2 \tag{16.4.9}$$

注意:指出(16.4.8)和(16.4.9)中的近似的适用条件是有意义的.它们是

1. $P_{fi}(t)\ll 1$(可应用一阶微扰论)

2. $\frac{2\pi}{t}\ll|\omega_{fi}|=\omega$($P_{fi}(t)$中无交叉项)

下面的条件也与之相容

3. $|T_{fi}^{\pm}|\ll\hbar\omega_{fi}$

**16.5**　一个质量为 $m$,电荷为 $e$ 的非自由粒子与一个频率展布在 $\omega\pm\delta\omega/2$ 区域内的非单色电磁场发生相互作用.粒子的无相互作用哈密顿算符 $H_0$ 为 $H_0=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})$,辐射强度由 $I=cu(\omega)\delta\omega$ 给出,此处 $u(\omega)$是单位角频率内的能量密度(见题16.3).设$|i\rangle$和$|f\rangle$是未微扰哈密顿算符 $H_0$ 的两个本征态,考虑跃迁概率 $P_{fi}(t)$.(a)证明对于共振吸收和共振发射的跃迁速率分别为

$$W_{fi}^{\text{abs}} = \frac{4\pi^2e^2u(\omega_{fi})}{m^2\hbar^2\omega_{fi}^2}|\langle f|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2,\quad E_f>E_i \tag{16.5.1}$$

$$W_{if}^{\text{ind}} = \frac{4\pi^2e^2u(\omega_{fi})}{m^2\hbar^2\omega_{fi}^2}|\langle f|-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2,\quad E_f>E_i \tag{16.5.2}$$

其中 $\hbar\omega_{fi}=E_f-E_i$,$|k|=|\omega_{fi}|/c$;(b)假定 $E_i<E_f$.证明细致平衡原理

$$W_{fi}^{\text{abs}} = W_{if}^{\text{ind}} \tag{16.5.3}$$

**解答**　(a) 应用题16.4的结果,以给定的频率 $\omega$ 为中心的长度为 $\delta\omega$ 的区域内的电磁场引起的发射和吸收的跃迁概率为

$$\delta P_{fi}^{\pm}(t) = \frac{e^2|A_0|^2}{m^2c^2\hbar^2}|\langle f|\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2\left\{\frac{\sin[(\omega_{fi}\pm\omega)t/2]}{(\omega_{fi}\pm\omega)/2}\right\}\delta\omega \tag{16.5.4}$$

其中正负号分别对应于吸收和发射的情况,将(16.5.4)中的$|A_0|^2$ 用(16.3.2)式代替

$$|A_0|^2 = \frac{2\pi c^2I}{\omega^2} = \frac{2\pi c^2u(\omega)}{\omega^2} \tag{16.5.5}$$

并对 $\delta\omega$ 求和,我们可以得到总跃迁概率 $P_{fi}^{\pm}(t)$

$$P_{fi}^{\pm}(t) = \frac{2\pi e^2}{m^2\hbar^2}\sum_{\delta\omega}\frac{u(\omega_{fi})\delta\omega}{\omega^2}|\langle f|\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2\left\{\frac{\sin[(\omega_{if}\pm\omega)t/2]}{(\omega_{fi}\pm\omega)/2}\right\}^2 \tag{16.5.6}$$

其中$|k|=\omega/c$.将对 $\delta\omega$ 的求和换成积分,我们得到

$$P_{fi}^{\pm}(t) = \frac{2\pi e^2}{m^2\hbar^2}\int\frac{u(\omega)}{\omega^2}|\langle f|\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2\left\{\frac{\sin[(\omega_{fi}\pm\omega)t/2]}{(\omega_{fi}\pm\omega)/2}\right\}^2\mathrm{d}\omega \tag{16.5.7}$$

(16.5.7)中的最后一项可用 $\pi t\delta[(\omega_{fi}\pm\omega)/2]$代替.由此得

$$P_{fi}^{\pm}(t) = \frac{4\pi^2e^2t}{m^2\hbar^2}\int\frac{u(\omega)}{\omega^2}|\langle f|\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2\delta(\omega_{fi}\pm\omega)\mathrm{d}\omega \tag{16.5.8}$$

这样,跃迁速率为

$$W_{fi}^{\text{abs}} = \frac{\mathrm{d}P_{fi}^{+}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{4\pi^2e^2}{m^2\hbar^2}\frac{u(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2}|\langle f|\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2,\omega_{fi}>0 \tag{16.5.9}$$

$$W_{if}^{\text{ind}} = \frac{\mathrm{d}P_{fi}^{-}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{4\pi^2e^2}{m^2\hbar^2}\frac{u(\omega_{if})}{\omega_{fi}^2}|\langle f|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\hat{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2,\omega_{fi}<0 \tag{16.5.10}$$

其中 $\hbar\omega_{fi}\equiv E_f-E_i$,$|k|=|\omega_{fi}|/c$.

(b)在 $E_i<E_f$ 时考虑$|i\rangle$到$|f\rangle$之间的跃迁.应用(16.5.1)和(16.5.2)我们得到

$$W_{fi}^{abs}=\frac{4\pi^2e^2}{m^2\hbar^2}\frac{u(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2}|\langle f|e^{ik\cdot r}\hat{\varepsilon}\cdot p|i\rangle|^2 \tag{16.5.11}$$

$$W_{if}^{ind}=\frac{4\pi^2e^2}{m^2\hbar^2}\frac{u(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2}|\langle i|e^{-ik\cdot r}\hat{\varepsilon}\cdot p|f\rangle|^2 \tag{16.5.12}$$

(16.5.12)中的矩阵元能够写成

$$\langle i|e^{-ik\cdot r}\hat{\varepsilon}\cdot p|f\rangle=\langle f|[(e^{-ik\cdot r})(\hat{\varepsilon}\cdot p)]^{\dagger}|i\rangle^*=\langle f|(\hat{\varepsilon}\cdot p)(e^{-ik\cdot r})^{\dagger}|i\rangle \tag{16.5.13}$$

其中†表示厄米共轭.在 $k\cdot\hat{\varepsilon}=0$ 和$[\hat{\varepsilon}\cdot p,e^{\pm ik\cdot r}]=0$下得到

$$\langle f|(\hat{\varepsilon}\cdot p)(e^{-ik\cdot r})^{\dagger}|i\rangle^*=\langle f|\hat{\varepsilon}\cdot pe^{ik\cdot r}|i\rangle^*=\langle f|e^{ik\cdot r}\hat{\varepsilon}\cdot p|i\rangle^* \tag{16.5.14}$$

其中利用了等式$[e^{\pm ik\cdot r}]^{\dagger}=e^{\mp ik\cdot r}$最后我们得到

$$\langle i|e^{-ik\cdot r}\hat{\varepsilon}\cdot p|f\rangle=\langle f|e^{ik\cdot r}\hat{\varepsilon}\cdot p|i\rangle^* \tag{16.5.15}$$

此即 $W_{if}^{abs}=W_{fi}^{ind}$.

**16.6** 考虑单个电子在线偏振辐射场中的矩阵元 $T_{fi}^{\pm}\equiv\langle f|e^{ik\cdot r}[\hat{\varepsilon}\cdot p+iS\cdot(k\times\hat{\varepsilon})]|i\rangle$,证明在长波近似下,$T_{fi}^{\pm}$有如下的多极展开:

$$T_{fi}^{\pm}\approx im\omega_{fi}\langle f|\hat{\varepsilon}\cdot r|i\rangle+\frac{i}{2}\langle f|(L+2S)\cdot(k\times\hat{\varepsilon})|i\rangle-\frac{m\omega_{fi}}{2}\langle f|(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot r)|i\rangle \tag{16.6.1}$$

其中,$\hat{\varepsilon}$是单位极化矢量,$k$ 为波矢,$L=r\times p$ 为轨道角动量.(16.6.1)中的三项分别对应于电偶极、磁偶极和电四极跃迁.

**解** 在长波极限下,$\exp(ik\cdot r)=1+ik\cdot r+\cdots$这样

$$T_{fi}^{\pm}\approx\langle f|\hat{\varepsilon}\cdot p|i\rangle+i\langle f|S\cdot(k\times\hat{\varepsilon})|i\rangle+i\langle f|(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot p)|i\rangle \tag{16.6.2}$$

由于 $k\cdot\hat{\varepsilon}=0$,$k\cdot r$ 和 $\hat{\varepsilon}\cdot p$ 是满足下式的互相对易的算符

$$(r\times p)\cdot(k\times\hat{\varepsilon})=(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot p)-(\hat{\varepsilon}\cdot r)(k\cdot p)$$

如此

$$2(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot p)=L\cdot(k\times\varepsilon)+(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot p)+(\hat{\varepsilon}\cdot r)(k\cdot p) \tag{16.6.3}$$

此处 $L=r\times p$.将(16.6.3)代入(16.6.2)后得到

$$T_{fi}^{\pm}\approx\langle f|\hat{\varepsilon}\cdot p|i\rangle+\frac{i}{2}\langle f|(L+2S)\cdot(k\times\hat{\varepsilon})|i\rangle+\frac{i}{2}\langle f|(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot p)+(k\cdot p)(\hat{\varepsilon}\cdot r)|i\rangle \tag{16.6.4}$$

这样证明(16.6.1)的工作就成了验证如下的矩阵等式:

$$\begin{cases}\langle f|(\hat{\varepsilon}\cdot p)|i\rangle=im\omega_{fi}\langle f|(\hat{\varepsilon}\cdot r)|i\rangle\\ \langle f|(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot p)+(\hat{\varepsilon}\cdot r)(k\cdot p)|i\rangle=im\omega_{fi}\langle f|(k\cdot r)(\hat{\varepsilon}\cdot r)|i\rangle\end{cases} \tag{16.6.5}$$

我们注意到$|i\rangle$和$|f\rangle$是 $H_0=p^2/2m+V(r)$的本征态.选取坐标系使得 $\hat{\varepsilon}$沿着 $z$ 轴方向而$k$ 沿着 $y$ 轴方向.此时有

$$[\hat{\varepsilon}\cdot r,H_0]=[z,H_0]=\frac{1}{2m}[z,p^2]=\frac{i\hbar}{m}p_z \tag{16.6.6}$$

和

$$[k\cdot r,H_0]=[yz,H_0]=\frac{i\hbar}{m}(yp_z+p_yz) \tag{16.6.7}$$

由此得到

$$\langle f|[z,H_0]|i\rangle=(E_i-E_f)\langle f|z|i\rangle=-\hbar\omega_{fi}\langle f|z|i\rangle \tag{16.6.8}$$

$$\langle f|[yz,H_0]|i\rangle=(E_i-E_f)\langle f|yz|i\rangle=-\hbar\omega_{fi}\langle f|yz|i\rangle \tag{16.6.9}$$

这样我们得到

$$\begin{cases}\langle f|p_z|i\rangle=\mathrm{i}m\omega_{fi}\langle f|z|i\rangle\\ \langle f|(yp_z+p_yz)|i\rangle=\mathrm{i}m\omega_{fi}\langle f|yz|i\rangle\end{cases} \tag{16.6.10}$$

对于 $\hat{\varepsilon}=\hat{z}$和 $\boldsymbol{k}=k\,\hat{y}$,这个结果与(16.6.5)相合.

**16.7** 给出中心势场中的电子在下列情况下的吸收和发射的选择定则(a)电偶极跃迁;(b)磁偶极跃迁;(c)电四极跃迁.

**解答** (a)电偶极跃迁:要得到电偶极跃迁的选择定则,我们来考虑如下的矩阵元$\langle f|x|i\rangle$,$\langle f|y|i\rangle$和$\langle f|z|i\rangle$,其中$|i\rangle$和$|f\rangle$为中心势场中电子的本征态.来微扰波函数由下式给出:

$$\begin{cases}|i\rangle\equiv|n_i,l_i,m_i\rangle\rightarrow\psi_{n_il_im_i}=R_{n_il_i}Y_{l_i}^{m_i}(\theta,\phi)\\ |f\rangle\equiv|n_f,l_f,m_f\rangle\rightarrow\psi_{n_fl_fm_f}=R_{n_fl_f}Y_{l_f}^{m_f}(\theta,\phi)\end{cases} \tag{16.7.1}$$

此处 $Y_l^m(\theta,\phi)$是球谐函数.在这种表示下

$$\begin{cases}x\pm\mathrm{i}y=r\sin\theta e^{\pm\mathrm{i}\phi}=\mp\sqrt{\dfrac{8\pi}{3}}rY_1^{\pm1}(\theta,\phi)\\ z=r\cos\theta=\sqrt{\dfrac{4\pi}{3}}rY_1^0(\theta)\end{cases} \tag{16.7.2}$$

这样矩阵元$\langle f|z|i\rangle$正比于角度积分

$$\int(Y_{l_f}^{m_f})^*(\theta,\phi)Y_1^0(\theta)Y_{l_i}^{m_i}(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega \tag{16.7.3}$$

它在 $\Delta l=l_f-l_i=\pm1$,$\Delta m=m_f-m_i=0$时才可能不为零.同理,矩阵元$\langle f|x|i\rangle$和$\langle f|y|i\rangle$是如下角度积分的线性组合:

$$\int(Y_{l_f}^{m_f})^*(\theta,\phi)Y_1^{\pm1}(\theta)Y_{l_i}^{m_i}(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega \tag{16.7.4}$$

在 $\Delta l=\pm1$,$\Delta m=\pm1$ 才有可能非零.最后我们得到选择定则

$$\begin{cases}\Delta l=l_f-l_i=\pm1\\ \Delta m=m_f-m_i=0,\pm1\end{cases} \tag{16.7.5}$$

(b) 磁偶极跃迁:磁偶极跃迁的选择定则决定于矩阵元$\langle f|L_x|i\rangle$,$\langle f|L_y|i\rangle$和$\langle f|L_z|i\rangle$.由角动量的一般性质(见第六章),我们得到

$$\langle f|(L_x+\mathrm{i}L_y)|i\rangle=\langle n_f,l_f,m_f|L_+|n_i,l_i,m_i\rangle\sim\delta_{l_fl_i}\delta_{m_f,m_i+1} \tag{16.7.6}$$

$$\langle f|(L_x-\mathrm{i}L_y)|i\rangle=\langle n_f,l_f,m_f|L_-|n_i,l_i,m_i\rangle\sim\delta_{l_fl_i}\delta_{m_f,m_i-1} \tag{16.7.7}$$

$$\langle f|L_z|i\rangle=\langle n_f,l_f,m_f|L_z|n_i,l_i,m_i\rangle\sim\hbar m_i\delta_{l_fl_i}\delta_{m_fm_i} \tag{16.7.8}$$

除非下列条件满足,磁偶极矩阵元必然为0

$$\begin{cases}\Delta l=l_f-l_i=0\\ \Delta m=m_f-m_i=0,\pm1\end{cases} \tag{16.7.9}$$

注意:如果粒子有自旋,我们还会得到$\Delta m_s=m_{s_f}-m_{s_i}=0,\pm1$.不过这个选择定则对于自旋1/2的粒子是自动满足的.

(c) 电四极跃迁:对于电四极跃迁,我们必须计算乘积 $xy,yz,zx,x^2,y^2$ 和 $z^2$ 相关的矩阵元.注意到 $yz$ 能够写成$r^2Y_2^1(\theta,\phi)$和 $r^2Y_2^{-1}(\theta,\phi)$的线性组合.矩阵元$\langle f|yz|i\rangle$包含如下形式的角度积分:

$$\int(Y_{l_f}^{m_f})^*(\theta,\phi)Y_2^{\pm1}(\theta)Y_{l_i}^{m_i}(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega \tag{16.7.10}$$

这个积分只有在 $\Delta l=0,\pm2$(除非 $l_f=l_i=0$), $\Delta m=\pm1$ 时才不为零. 如果考虑任意方向的极化,最后一个条件变成 $\Delta m=\pm2,\pm1,0$. 电四极跃迁的选择定则是

$$\begin{cases}\Delta l = l_f - l_i = 0,\ \pm 2\\ \Delta m = m_f - m_i = 0,\ \pm1,\ \pm2\end{cases} \tag{16.7.11}$$

这里已经包含了 $l_f=l_i=0$ 的情况.

注意:(1)电偶极相互作用项具有奇宇称,它只有在具有不同宇称的态之间才有矩阵元. 由于态 $|nlm\rangle$ 的宇称为 $(-1)^l$, $\Delta l$ 如(16.7.5)所示必须是奇数. (2)磁偶极和电四极相互作用项都具有偶宇称,在宇称相同的态间矩阵元不为零. 这与(16.7.9)和(16.7.11)也相合. (3)磁偶极和电四极跃迁在量级上无法与电偶极跃迁相比. (4)对于 $\Delta l=0, \Delta m=0,\pm1$ 的情况,同时存在磁偶极和电四极跃迁. 而在 $\Delta l=\pm2$ 时就只有电四极跃迁了.

**16.8** **一个质量为 $m$,角频率为 $\omega_0$,电荷为 $e$ 的三维各向同性谐振子放在线偏振辐射场里. 对于 $\omega_{fi}=\omega_0$ 和 $\omega_{fi}=\pm2\omega_0$,计算单位时间内共振跃迁的概率.**

**解答** 选取坐标系使得矢量 $\hat{\varepsilon}$ 沿 $z$ 轴方向而矢量 $\boldsymbol{k}$ 沿 $y$ 轴方向. 吸收对应的跃迁速率(发射对应的跃迁速率的最后结果相同)*

$$W_{fi} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2\hbar^2}\frac{u(\omega_{fi})}{\omega_{fi}^2}\left|\langle n_x^f, n_y^f, n_z^f \mid e^{+iky}p_z \mid n_x^i, n_y^i, n_z^i\rangle\right|^2 \tag{16.8.1}$$

其中 $|n_x,n_y,n_z\rangle$ 和 $E_{n_x,n_y,n_z}=\hbar\omega_0(n_x+n_y+n_z+3/2)$ 是未微扰谐振子的本征态和本征值. 应用第五章中的结果,我们有

$$\begin{cases} p_z \mid n_x,n_y,n_z\rangle = i\sqrt{\dfrac{m\hbar\omega_0}{2}}\left(\sqrt{n_z+1}\mid n_x,n_y,n_z+1\rangle - \sqrt{n_z}\mid n_x,n_y,n_z-1\rangle\right)\\ k_y \mid n_x,n_y,n_z\rangle = k\sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega_0}}\left(\sqrt{n_y+1}\mid n_x,n_y+1,n_z\rangle - \sqrt{n_y}\mid n_x,n_y-1,n_z\rangle\right)\end{cases} \tag{16.8.2}$$

由此

$$\langle n_x^f, n_y^f, n_z^f \mid e^{+iky}p_z \mid n_x^i, n_y^i, n_z^i\rangle = \langle n_x^f \mid n_x^i\rangle\langle n_y^f \mid (1+ky+\cdots)\mid n_y^i\rangle\langle n_z^f \mid p_z \mid n_y^i\rangle \tag{16.8.3}$$

在这里我们忽略阶次为 $\hbar\omega_0/mc^2\ll1$ 的高阶项. 这些项只有诸如 $\omega_{fi}=3\omega_0, 4\omega_0$ 等高阶跃迁里才显得重要. (16.8.3)的非零条件为

$$\Delta n_x = 0, \Delta n_y = 0,\pm1, \Delta n_z = \pm1 \tag{16.8.4}$$

实际上,电偶极跃迁($\Delta n_y=0$)和电四极跃迁($\Delta n_y=\pm1$)的贡献是无法相比的. 对应跃迁的能级差是 $\omega_{fi}=\omega_0(\Delta n_x+\Delta n_y+\Delta n_z)$. 这样

$$\langle n_x^f, n_y^f, n_z^f \mid e^{+iky}p_z \mid n_x^i, n_y^i, n_z^i\rangle = \begin{cases} i\sqrt{\dfrac{m\hbar\omega_0}{2}}\sqrt{n_z^i+1}, \omega_{fi}=\omega_0\\ i\sqrt{\dfrac{\hbar k}{2}}\sqrt{n_z^i+1}\sqrt{n_y^i+1}, \omega_{fi}=2\omega_0\end{cases} \tag{16.8.5}$$

将(16.8.5)代入(16.8.1)并利用 $k=\omega_{fi}/c$,我们得到

$$W_{fi} = 2\pi^2 e^2 \times \begin{cases}\dfrac{u(\omega_0)}{m\hbar\omega_0}(n_z^i+1), \omega_{fi}=\omega_0\\ \dfrac{u(\omega_0)}{m^2c^2}(n_z^i+1)(n_y^i+1), \omega_{fi}=2\omega_0\end{cases} \tag{16.8.6}$$

---

* 此处原文为:"(and for indused emission)". 这个说法是错误的. 虽然在本题中最后算出来的发射对应的跃迁速率正好等于吸收对应的跃迁速率,但这只是本题在后面的近似下得到的特殊的结果,而非一般性的结论. 而且(16.8.1)式也不能用来描述发射对应的跃迁速率. 不过由于最后计算的方法和计算结果都相同,我们也就不对发射的情况另行计算了——译者注.

对于同样的入射流强，$W(2\omega_0)/W(\omega_0)\sim\hbar\omega_0/mc^2$.

**16.9**　一个本征值 $E_2>E_1$ 的两能级系统与一个绝对温度为 $T$ 的热库处于热力学平衡.系统中存在允许下列几种跃迁：(1)"吸收"1→2，(2)"发射"2→1 和(3)"自发辐射"2→1.每个过程的跃迁速率为

$$\begin{cases}W_{21}^{\text{abs}}=P_1B_{21}u(\omega_{21})\\ W_{12}^{\text{ind}}=P_2B_{12}u(\omega_{21})\\ W_{12}^{\text{spon}}=P_2A_{12}\end{cases}\tag{16.9.1}$$

其中 $u(\omega_{21})$为辐射场的能量分布，$P_j$ 是系统处于简并度为$g_j$ 的能级$j(j=1,2)$中的概率，$A_{12}$和 $B_{12}$分别是对于自发辐射和发射的爱因斯坦系数.(a)在热平衡条件下计算 $P_1$ 和 $P_2$；(b)应用(16.9.1)和 Planck 黑体辐射公式证明

$$\begin{cases}g_1B_{21}=g_2B_{12}\\ A_{12}=\dfrac{\hbar\omega_{21}^3}{\pi^2c^3}B_{12}\end{cases}\tag{16.9.2}$$

**解答**　(a)在绝对温度 $T$ 下的热平衡系统处于某一个能量为$\varepsilon_i$ 的定态$|i\rangle$中的概率正比于 Boltzmann 因子 $e^{-\varepsilon_i/kT}$.本题中的 $\varepsilon_i$ 取值为$E_1$、$E_2$.而简并度 $g_i$ 取值为$g_1$、$g_2$.此即

$$\begin{cases}P_1=Cg_1e^{-E_1/kT}\\ P_2=Cg_2e^{-E_2/kT}\end{cases}\tag{16.9.3}$$

这里 $C$ 是归一化常数.由 $P_1+P_2=1$，得到

$$C^{-1}=g_1e^{-E_1/kT}+g_2e^{-E_1/kT}\tag{16.9.4}$$

由于 $E_2-E_1=\hbar\omega_{21}$我们有

$$\frac{P_1}{P_2}=\frac{g_1}{g_2}e^{\hbar\omega_{21}/kT}\tag{16.9.5}$$

(b)假定空腔内大量由(a)描述的物理系统构成的系综在绝对温度 $T$ 下靠自身的辐射过程维持热力学平衡，此时我们有

$$W_{21}^{\text{abs}}=W_{12}^{\text{ind}}+W_{12}^{\text{spon}}\tag{16.9.6}$$

由(16.9.1)我们得到

$$P_1B_{21}u(\omega_{21})=P_2B_{12}u(\omega_{21})+P_2A_{12}\tag{16.9.7}$$

应用(16.9.5)

$$[g_1e^{\hbar\omega_{21}/kT}B_{21}-g_2B_{12}]u(\omega_{21})=g_2A_{12}\tag{16.9.8}$$

空腔内的热辐射由 Planck 公式给出

$$u(\omega)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3(e^{\hbar\omega/kT}-1)}\tag{16.9.9}$$

这样(16.9.8)成为

$$g_1B_{21}\left(e^{\hbar\omega_{21}/kT}-\frac{g_2B_{12}}{g_1B_{21}}\right)\frac{\hbar\omega_{21}^3}{\pi^2c^3}=g_2A_{12}(e^{\hbar\omega_{21}/kT}-1)\tag{16.9.10}$$

此即

$$\begin{cases}g_1B_{21}=g_2B_{12}\\ A_{12}=\dfrac{\hbar\omega_{21}^3}{\pi^2c^3}B_{12}\end{cases}\tag{16.9.11}$$

**16.10**　对于中心力场中的电子计算爱因斯坦系数 $A_{1s2p}$、$B_{1s2p}$和 $B_{2p1s}$.注意：$1s=(n=1,l=$

0),2p=($n=2,l=1$).

**解答** 我们首先考虑 1s→2p 单位时间的跃迁概率(吸收).由于 2p 态对于不同的磁量子数是简并的,我们有

$$W_{2p1s}=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}u(\omega_{21})\sum_{m'=-1}^{1}|\langle 21m'|\boldsymbol{r}|100\rangle|^2\equiv B_{2p1s}u(\omega_{21}) \tag{16.10.1}$$

由于

$$\sum_{m'}|\langle n',l+1,m'|\boldsymbol{r}|nlm\rangle|^2=(l+1)|\langle n',l+1|r|nl\rangle|^2 \tag{16.10.2}$$

和

$$\sum_{m'}|\langle n',l-1,m'|\boldsymbol{r}|nlm\rangle|^2=l|\langle n',l-1|r|nl\rangle|^2 \tag{16.10.3}$$

将 $l=0$ 代入(16.10.3)并利用(16.10.1),我们得到

$$B_{2p1s}=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}|\langle 21|r|10\rangle|^2 \tag{16.10.4}$$

其中$\langle 21|r|10\rangle=\int_0^\infty R_{21}^*(r)r^3R_{10}(r)\mathrm{d}r$ 是辐射积分.在(16.9.11)中取 $g_{1s}=1$ 和 $g_{2p}=3$,我们得到 2p→1s 的跃迁系数

$$\begin{cases}B_{1s2p}=\dfrac{4\pi^2e^2}{9\hbar^2}|\langle 10|r|21\rangle|^2\\[2ex] A_{1s2p}=\dfrac{4\omega_{21}^3e^2}{9\hbar c^3}|\langle 10|r|21\rangle|^2\end{cases} \tag{16.10.5}$$

**16.11** 给出氢原子第一激发态单位时间内的自发跃迁概率.

**解答** 2p→1s 单位时间的自发跃迁概率为

$$W_{1s2p}=u(\omega_{21})B_{1s2p}+A_{1s2p} \tag{16.11.1}$$

利用(16.10.5),我们得到

$$W_{1s2p}=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2}\left[u(\omega_{21})+\frac{\hbar\omega_{21}^3}{\pi^2c^3}\right]|\langle 100|\boldsymbol{r}|21m'\rangle|^2 \tag{16.11.2}$$

此处$|21m'\rangle$是某一个 2p 状态.对于氢原子的第一激发态

$$|\langle 100|\boldsymbol{r}|21m'\rangle|^2=\frac{1}{3}|\langle 10|r|21\rangle|^2=\frac{5}{9}a_0^2 \tag{16.11.3}$$

其中 $a_0=\hbar^2/me^2$ 是玻尔半径.由此

$$A_{1s2p}=\frac{20}{27}\frac{e^2\omega_{21}^3}{\hbar c^3}a_0^2=\frac{20}{27}\alpha\frac{\omega_{21}^3}{c^2}a_0^2=\frac{20}{27}\frac{\omega_{21}^3}{c^4}\frac{\hbar^2}{m^2\alpha} \tag{16.11.4}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c=1/137$ 是精细结构常数.由

$$\hbar\omega_{21}=\frac{3}{4}\frac{e^2}{2a_0}=\frac{3}{4}\frac{\alpha^2mc^2}{2} \tag{16.11.5}$$

得到

$$A_{1s2p}=\frac{20}{8^3}\alpha^5\frac{mc^2}{\hbar}=\frac{5}{48}\alpha^3\omega_{21}\approx 6.25\times 10^{-8}\mathrm{s}^{-1} \tag{16.11.6}$$

(16.11.6)对应于大约为 $1.5\times 10^{-9}$s 的 2p 能级寿命.

**16.12** 一个质量为 $m$,角频率为 $\omega_0$,电荷为 $e$ 的线性谐振子被如下形式的非共振辐射场激发:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\begin{cases}2A_0\hat{z}\cos(ky-\omega t), & t>0\\ 0, & t\leqslant 0\end{cases} \tag{16.12.1}$$

其中 $\omega\neq\omega_0$. 设 $|n\rangle$ 和 $E_n=\hbar\omega_0(n+\frac{1}{2})$ 为谐振子的本征态和能量本征值, $|\psi(t)\rangle$ 为有辐射场时系统的态矢. (a)应用一阶微扰论计算 $|\psi(t)\rangle$ 假定初始时 $|\psi(t=0)\rangle=|0\rangle$; (b)计算与外场振幅成正比的诱导偶极矩.

**解** (a)与时间相关的态矢可写成下式:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle+\sum_{n\neq0}a_n(t)e^{-iE_0t/\hbar}|n\rangle \tag{16.12.2}$$

在 $t<0$ 时 $a_n(t)=0$. 对于 $H'(t)=\frac{-e}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\mathbf{p}$ 应用一阶微扰论(见第十章),我们得到

$$a_n^{(1)}(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{n0}t'}\langle n|H'(t')|0\rangle dt'=\frac{ie}{mc\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{n0}t'}2A_0\cos(ky-\omega t)\langle n|p_x|0\rangle dt' \tag{16.12.3}$$

由此(见题 16.4),

$$a_n^{(1)}(t)=-\frac{e^{i(\omega_{n0}-\omega)t}-1}{\omega_{n0}-\omega}\frac{T_{n0}^+}{\hbar}-\frac{e^{i(\omega_{n0}+\omega)t}-1}{\omega_{n0}+\omega}\frac{T_{n0}^-}{\hbar} \tag{16.12.4}$$

其中

$$\begin{cases}T_{n0}^+\equiv-\frac{e}{mc}\langle n|A_0e^{iky}p_x|0\rangle=-\frac{ie\omega_{n0}}{e}A_0e^{iky}\langle n|ez|0\rangle\\ T_{n0}^-\equiv-\frac{e}{mc}\langle n|A_0e^{-iky}p_x|0\rangle=-\frac{ie\omega_{n0}}{e}A_0e^{-iky}\langle n|ez|0\rangle\end{cases} \tag{16.12.5}$$

最后,将 $|\psi(t)\rangle$ 乘上整体相因子 $e^{iE_0t/\hbar}$,我们得到

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle=|\psi(t)\rangle e^{iE_0t/\hbar}=|0\rangle+\sum_{n\neq0}b_n(t)|n\rangle \tag{16.12.6}$$

其中系数 $b_n(t)=a_n(t)e^{i\omega_{n0}t}$ 由(16.12.4)给出

$$b_n(t)=-\frac{e^{-i\omega t}-e^{-i\omega_{n0}t}}{\omega_{n0}-\omega}\frac{T_{n0}^+}{\hbar}-\frac{e^{i\omega t}-e^{-i\omega_{n0}t}}{\omega_{n0}+\omega}\frac{T_{n0}^-}{\hbar} \tag{16.12.7}$$

(b) 诱导偶极矩由 $\langle D(t)\rangle=\langle\tilde{\psi}(t)|ez|\tilde{\psi}(t)\rangle$ 给出. 计算到 $A_0$ 的一阶,得到

$$\langle D(t)\rangle=\langle0|ez|0\rangle+\sum_{n\neq0}b_n(t)\langle0|ez|n\rangle+\sum_{n\neq0}b_n^*(t)\langle0|ez|n\rangle \tag{16.12.8}$$

下一步,我们将(16.12.7)中得到的 $b_n(t)$ 代入并忽略所有的与频率 $\pm\omega_{n0}$ 相关的振动模式. (这些项在 $t\to\infty$ 时由于激发态的寿命有限而不再出现.)此时我们有

$$\langle D(t)\rangle=\langle0|ez|0\rangle-\frac{2}{\hbar}\mathrm{Re}\left\{\sum_{n\neq0}\left[\frac{T_{n0}^+\langle0|ez|n\rangle e^{-i\omega t}}{\omega_{n0}-\omega}+\frac{T_{n0}^-\langle0|ez|n\rangle e^{i\omega t}}{\omega_{n0}+\omega}\right]\right\} \tag{16.12.9}$$

和

$$\langle D(t)\rangle=\langle0|ez|0\rangle-\frac{2A_0}{\hbar c}\sum_{n\neq0}|\langle0|ez|n\rangle|^2\omega_{n0}\mathrm{Im}\left[\frac{e^{-i(ky-\omega t)}}{\omega_{n0}-\omega}+\frac{e^{-i(ky-\omega t)}}{\omega_{n0}+\omega}\right] \tag{16.12.10}$$

最后由 $E=-\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}=-2A_0k\,\hat{z}\sin(ky-\omega t)$,我们得到

$$\langle D(t)\rangle=\langle0|ez|0\rangle+\frac{2E_z}{\hbar}\sum_{n\neq0}\frac{|\langle0|ez|n\rangle|^2}{\omega_{n0}^2-\omega^2}\omega_{n0} \tag{16.12.11}$$

对于线性谐振子,(16.12.11)给出经典的结果

$$\langle D(t)\rangle=\frac{e^2}{m(\omega_0^2-\omega^2)}E_z$$

## 补 充 习 题

**16.13** 对于题16.4,计算从初态$|i\rangle$到能量为$E_f \pm \mathrm{d}E_f/2$的连续末态内的跃迁速率$W_{fi}$(Fermi金律).

**答案**

$$W_{fi} = \frac{\mathrm{d}P_{fi}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | T^{+} | i\rangle|^2 \rho(E_f = E_i + \hbar\omega)$$

其中$\rho(E_f) = \mathrm{d}N_f/\mathrm{d}E_f$为末态密度,$T_{fi}^{+}$由(16.4.6)给出.

**16.14** 给出单电子系统在各向同性的辐射场中对应于电偶极辐射的吸收和发射的跃迁速率.提示:跃迁速率可以由电偶极矩阵元对所有可能的极化方向的平均得到.

**答案**

$$W_{fi} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} u(\omega_{fi}) |\langle f | \boldsymbol{r} | i\rangle|^2, 其中 |\langle f | \boldsymbol{r} | i\rangle|^2 \equiv \langle f | \boldsymbol{r} | i\rangle \cdot \langle f | \boldsymbol{r} | i\rangle^* .$$

**16.15** 跃迁$|k\rangle \to |n\rangle$对应的振子强度由下式定义:

$$f_{nk} = f_{nk}^x + f_{nk}^y + f_{nk}^z \equiv (2m\omega_{nk}/\hbar) |\langle n | \boldsymbol{r} | k\rangle|^2 \tag{16.15.1}$$

其中$|n\rangle$和$|k\rangle$是$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$的本征态.证明$f_{nk}$满足求和公式$\sum_n f_{nk} = 3$.

**16.16** 在考虑自旋-轨道相互作用时,给出下列情况下吸收和发射的选择定则(a)电偶极辐射;(b)磁偶极辐射;(c)电四极辐射.注意:选择定则可以通过把定态$|lS;JM_J\rangle$展开成$|lm\rangle \otimes |Sm_s\rangle$的线性组合来给出.其中$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$.

**答案** (a)电偶极辐射:$\Delta l = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1, \Delta M_J = 0, \pm 1$;

(b)磁偶极辐射:$\Delta l = 0, \Delta J = 0, \pm 1, \Delta M_J = 0, \pm 1$;

(c)电四极辐射:$\Delta l = 0, \pm 2, \Delta J = 0, \pm 1, \pm 2, \Delta M_J = 0, \pm 1, \pm 2$.

# 数学附录

## A.1 傅里叶级数和傅里叶积分

若 $f(x)$是周期为 $L$ 的周期函数,它就可以展开成傅里叶级数:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{ik_n x} \tag{A.1}$$

其中 $k_n = 2\pi n/L$.级数的系数 $a_n$ 由下式给出:

$$a_n = \frac{1}{L}\int_0^L f(x)e^{-ik_n x}dx \tag{A.2}$$

函数 $f(x)$的傅里叶变换的定义为

$$F(k) = F[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx \tag{A.3}$$

逆傅里叶变换为

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{ikx}dk \tag{A.4}$$

在量子力学中,我们定义的傅里叶变换有些不同:

$$\psi(k) = F[\psi(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)e^{-ipx/\hbar}dx \tag{A.5}$$

和

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(k)e^{ipx/\hbar}dk \tag{A.6}$$

下面两个关于傅里叶变换的公式是非常重要的:

模恒等式: $$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 dk \tag{A.7}$$

Parseval 等式: $$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g^*(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} F(k)G^*(k)dk \tag{A.8}$$

## A.2 狄拉克 δ 函数

狄拉克 δ 函数由下式定义:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0) \tag{A.9}$$

下边有一些关于 δ 函数的重要而且常用的等式:

$$\delta(-x) = \delta(x) \tag{A.10}$$

$$\delta(cx) = \frac{1}{c}\delta(x), \quad c > 0 \tag{A.11}$$

$$x\delta(x-x_0) = x_0\delta(x-x_0) \tag{A.12}$$

注意到 $x\delta(x)=0$,还有

$$f(x)\delta(x-x_0)=f(x_0)\delta(x-x_0) \tag{A.13}$$

$$\delta(x^2-c^2)=\frac{1}{2c}[\delta(x-c)+\delta(x+c)],\quad c>0 \tag{A.14}$$

$$\delta[f(x)]=\sum_i\frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i) \tag{A.15}$$

其中 $x_i$ 是$f(x)$的单零点.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_1)\delta(x-x_2)\mathrm{d}x=\delta(x_1-x_2) \tag{A.16}$$

$\delta'(x)$由下式定义:

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta'(x)\mathrm{d}x=-f'(0) \tag{A.17}$$

一些与 $\delta'(x)$相关的等式开列如下:

$$\delta'(-x)=-\delta'(x) \tag{A.18}$$

$$\delta^{(n)}(-x)=(-1)^n\delta^{(n)}(x) \tag{A.19}$$

$$x\delta^{(n)}(x)=-n\delta^{(n-1)}(x) \tag{A.20}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta^n(x)\mathrm{d}x=(-1)^nf^{(n)}(0) \tag{A.21}$$

三维空间中的 $\delta$ 函数由下式定义:

$$\int f(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=f(\boldsymbol{r}_0) \tag{A.22}$$

其中 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_0)\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}_0)$. 在球坐标$(r,\theta,\phi)$里,我们有

$$\begin{aligned}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)&=\frac{1}{r^2\sin\theta}\delta(r-r_0)\delta(\theta-\theta_0)\delta(\phi-\phi_0)\\&=\frac{1}{r^2}\delta(r-r_0)\delta(\cos\theta-\cos\theta_0)\delta(\phi-\phi_0)\end{aligned} \tag{A.23}$$

$\delta$ 函数的积分表示可以由傅里叶变换[见 A.1]的定义得出

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-x_0)}\mathrm{d}x \tag{A.24}$$

阶跃函数 $\theta(x)$(也称为 Heaviside 函数)的定义如下:

$$\theta(x)=\begin{cases}1, & x>0\\0, & x<0\end{cases} \tag{A.25}$$

$\delta$ 函数和 $\theta$ 函数之间的关系为

$$\delta(x)=\frac{\mathrm{d}\theta(x)}{\mathrm{d}x} \tag{A.26}$$

最后,我们有 $\delta(\boldsymbol{r})$的一个重要等式

$$\nabla^2\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}) \tag{A.27}$$

## A.3 厄米多项式

厄米多项式 $\mathrm{H}_n(x)$由下面的关系定义:

$$\mathrm{H}_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2}\left(\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\mathrm{e}^{-x^2}\right), \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{A.28}$$

$\mathrm{H}_n(x)$是下面的微分方程的解：

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{H}_n(x)}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{dH}_n(x)}{\mathrm{d}x} + 2n\mathrm{H}_n(x) = 0 \tag{A.29}$$

$\mathrm{H}_n(x)$的正交关系为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{H}_m(x)\mathrm{H}_n(x)\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn} \tag{A.30}$$

$\mathrm{H}_n(x)$的两个重要的递推关系为

$$\frac{\mathrm{dH}_n(x)}{\mathrm{d}x} = 2n\mathrm{H}_n(x),\ \mathrm{H}_{n+1}(x) = 2x\mathrm{H}_n(x) - 2n\mathrm{H}_{n-1}(x)$$

前几个厄米多项式由下式给出：

$\mathrm{H}_0(x)=1$, $\mathrm{H}_1(x)=2x$, $\mathrm{H}_2(x)=4x^2-2$

$\mathrm{H}_3(x)=8x^3-12x$, $\mathrm{H}_4(x)=16x^4-48x^2+12$

## A.4 勒让德多项式

勒让德多项式 $\mathrm{P}_l(x)$由 Rodrigue 公式定义，

$$\mathrm{P}_l(x) = \frac{(-1)^l}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}(x^2-1)^l \tag{A.31}$$

前几个勒让德多项式为

$\mathrm{P}_0(x)=1$, $\mathrm{P}_1(x)=x$, $\mathrm{P}_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$

$\mathrm{P}_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$, $\mathrm{P}_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$

用 $\cos\theta$ 给出的前几个勒让德多项式为

$\mathrm{P}_0(\cos\theta)=1$, $\mathrm{P}_1(\cos\theta)=\cos\theta$

$\mathrm{P}_2(\cos\theta)=\frac{1}{4}(1+3\cos2\theta)$, $\mathrm{P}_3(\cos\theta)=\frac{1}{8}(3\cos\theta+5\cos3\theta)$

勒让德多项式的正交关系为

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{P}_l(x)\mathrm{P}_{l'}(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \tag{A.32}$$

## A.5 连带勒让德函数

连带勒让德函数 $P_l^m(x)$由下式定义：

$$P_l^m(x) = \sqrt{(1-x^2)^m}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\mathrm{P}_l(x), \quad -1\leqslant x\leqslant 1 \tag{A.33}$$

其中 $m>0$. $\mathrm{P}_l(x)$是勒让德多项式.注意

$$P_l^0(x) = \mathrm{P}_l(x), P_l^m(x) = 0, m > l \tag{A.34}$$

$P_l^m(x)$满足的微分方程为

$$\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\right]P_l^m(x) = 0 \tag{A.35}$$

前几个连带勒让德函数为

$$P_1^1(x)=\sqrt{1-x^2},\qquad P_2^1(x)=3x\sqrt{1-x^2},\qquad P_2^2(x)=3(1-x^2)$$

$$P_3^1(x)=\frac{3}{2}(5x^2-1)\sqrt{1-x^2},P_3^2(x)=15x(1-x^2),\qquad P_3^3(x)=15\sqrt{(1-x^2)^3}$$

连带勒让德函数的正交性关系为

$$\int_{-1}^{1}P_l^m(x)P_{l'}^m(x)\mathrm{d}x=\int_0^\pi P_l^m(\cos\theta)P_{l'}^m(\cos\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'}\quad(\mathrm{A.36})$$

## A.6 球谐函数

球谐函数由下式定义：

$$\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi},m\geqslant0\qquad(\mathrm{A.37})$$

和

$$\mathrm{Y}_l^{-m}(\theta,\phi)=(-1)^m[\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)]^*\qquad(\mathrm{A.38})$$

$\mathrm{Y}_m^l(\theta,\phi)$满足的微分方程为

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+l(l+1)\right]\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)=0\qquad(\mathrm{A.39})$$

$\mathrm{Y}_m^l(\theta,\phi)$有确定的宇称

$$\mathrm{Y}_l^m(\pi-\theta,\pi+\phi)=(-1)^l\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)\qquad(\mathrm{A.40})$$

球谐函数的正交性关系为

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^\pi[\mathrm{Y}_{l'}^{m'}(\theta,\phi)]^*\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)\sin\theta\mathrm{d}\theta=\delta_{l'l}\delta_{m'm}\qquad(\mathrm{A.41})$$

封闭性关系为

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)[\mathrm{Y}_l^m(\theta',\phi')]^*=\delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\phi-\phi')=\frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')$$

$$(\mathrm{A.42})$$

一些重要的递推关系如下：

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-m\cot\theta\right)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)=\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\mathrm{Y}_l^{m+1}(\theta,\phi)\qquad(\mathrm{A.43})$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}-m\cot\theta\right)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)=\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\mathrm{Y}_l^{m-1}(\theta,\phi)\qquad(\mathrm{A.44})$$

$$\mathrm{Y}_l^m(\theta,\phi)\cos\theta=\sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}}\mathrm{Y}_{l+1}^m+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\mathrm{Y}_{l-1}^m\quad(\mathrm{A.45})$$

前几个球谐函数如下：

$$\mathrm{Y}_0^0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\mathrm{Y}_1^0=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad \mathrm{Y}_1^1=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$$

$$Y_2^0=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),\quad Y_2^1=-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\phi},\quad Y_2^2=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi}$$

$$Y_3^0=\sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta),\quad Y_3^1=-\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{i\phi}$$

$$Y_3^2=\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta e^{2i\phi},\quad Y_3^3=-\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta e^{3i\phi}$$

关于球谐函数的一个重要公式如下：

$$P_l(\cos\alpha)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}(-1)^m Y_l^m(\theta_1,\phi_1)Y_l^m(\theta_2,\phi_2) \tag{A.46}$$

其中 $\alpha$ 为$(\theta_1,\phi_1)$和$(\theta_2,\phi_2)$之间的夹角.这个结果常被称为球谐函数的加法定理.

## A.7 连带拉盖尔多项式

首先我们用 Rodrigue 公式定义拉盖尔多项式

$$L_l(x)=e^x\frac{d^l}{dx^l}(x^l e^{-x}) \tag{A.47}$$

连带拉盖尔多项式的定义为

$$L_l^m(x)=\frac{d^m}{dx^m}L_l(x) \tag{A.48}$$

其中 $l$ 和 $m$ 是非负整数.注意到

$$L_l^0(x)=L_l(x),\quad L_l^0(x)=0,\qquad m>1 \tag{A.49}$$

前几个连带拉盖尔多项式为

$$L_1^1(x)=-1,\qquad L_2^1(x)=2x-4,\qquad L_2^2(x)=2$$
$$L_3^1(x)=-3x^2+18x-18,\quad L_3^2(x)=-6x+18,\quad L_2^3(x)=-6$$

连带拉盖尔多项式的正交性关系为

$$\int_0^\infty x^m e^{-x}L_l^m(x)L_{l'}^m(x)dx=\frac{(l!)^3}{(l-m)!}\delta_{ll'} \tag{A.50}$$

## A.8 球贝塞尔函数

贝塞尔微分方程由下式给出：

$$\left[x^2\frac{d^2}{dx^2}+x\frac{d}{dx}+(x^2-l^2)\right]J_l(x)=0 \tag{A.51}$$

其中 $l\geqslant0$.这个方程的一个解称为 $l$ 阶贝塞尔函数 $J_l(x)$.$J_l(x)$的级数展开如下：

$$J_l(x)=\frac{x^l}{2^l\Gamma(l+1)}\left[1-\frac{x^2}{2(2l+2)}+\frac{x^4}{2\cdot4(2l+2)(2l+4)}\right]=\sum_{R=0}^{\infty}\frac{(-1)^k(x/2)^{l+2k}}{n!\Gamma(l+k+1)} \tag{A.52}$$

若 $l=0,1,2,\cdots$,$J_{-l}(x)=(-1)^l J_l(x)$.如果 $l\neq0,1,2,\cdots$,$J_l(x)$和 $J_{-l}(x)$线性无关.此时 $J_l(x)$在 $x=0$时是有界的,而 $J_{-l}(x)$是无界的第二类贝塞尔函数.$N_l(x)$(也称为诺伊曼函数)由下式定义：

$$N_l(x)=\frac{J_l(x)\cos(l\pi)-J_{-l}(x)}{\sin(l\pi)}\qquad(l\neq0,1,2,\cdots) \tag{A.53}$$

这些函数在 $x=0$ 时无界.(A.51)的一般解为

$$\begin{cases} y(x) = AJ_l(x) + BJ_{-l}(x), & l \neq 0,1,2,\cdots \\ y(x) = AJ_l(x) + BN_l(x), \end{cases} \tag{A.54}$$

此处 $A$ 和 $B$ 为任意常数.球贝塞尔函数与贝塞尔函数之间的关系如下：

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x) \tag{A.55}$$

球诺伊曼函数与诺伊曼函数 $N_l(x)$ 之间的关系如下：

$$n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{l+1/2}(x) \tag{A.56}$$

$j_l(x)$ 和 $n_l(x)$ 的明显形式如下：

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \left(\frac{\sin x}{x}\right) \tag{A.57}$$

$$n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \left(\frac{\cos x}{x}\right) \tag{A.58}$$

前几个 $j_l(x)$ 和 $n_l(x)$ 为

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \qquad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \qquad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3}{x^2}\cos x, \; n_2(x) = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3}{x^2}\sin x$$

$j_l(x)$ 和 $n_l(x)$ 在 $x\to\infty$ 和 $x\to 0$ 时的渐近行为是

$$\begin{cases} j_l(x)_{x\to 0} \to \dfrac{x^l}{(2l+1)!!} \\ n_l(x)_{x\to 0} \to -\dfrac{(2l-1)!!}{x^{l+1}} \end{cases} \tag{A.59}$$

$$\begin{cases} j_l(x)_{x\to\infty} \to \dfrac{1}{x}\sin\left(x - \dfrac{\pi l}{2}\right) \\ n_l(x)_{x\to\infty} \to -\dfrac{1}{x}\cos\left(x - \dfrac{\pi l}{2}\right) \end{cases} \tag{A.60}$$

其中 $(2l+1)!! = 1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l-1)(2l+1)$.